

**Theorie und Fabrikation  
von Subwellenlängenstrukturen  
am Beispiel polarisierender Metallstreifengitter**

**Dissertation**

zur Erlangung des akademischen Grades  
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt dem Rat der Physikalisch-Astronomischen Fakultät  
der Friedrich-Schiller-Universität Jena

von Bernd Schnabel  
geboren am 18. Juni 1968 in Jena

Gutachter:

1. \_\_\_\_\_

2. \_\_\_\_\_

3. \_\_\_\_\_

Tag des Rigorosums: \_\_\_\_\_

Tag der öffentlichen Verteidigung: \_\_\_\_\_

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1	Einordnung der vorliegenden Arbeit . . . . .	3
2.1.1	Der Metallstreifen-Polarisator . . . . .	3
2.1.2	Bisherige experimentelle Arbeiten . . . . .	4
2.2	Binäre Subwellenlängen-Metallstreifengitter . . . . .	5
2.2.1	Aufbau der Gitter . . . . .	5
2.2.2	Geometrische Gittercharakterisierung . . . . .	7
2.2.3	Optische Gittercharakterisierung . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Herstellung und Charakterisierung der Gitter</b>	<b>9</b>
3.1	Gitterherstellung . . . . .	9
3.1.1	Allgemeines . . . . .	9
3.1.2	Erzeugung des Gitterprofils . . . . .	9
3.1.3	Besonderheiten der Elektronenstrahlbelichtungsanlage LION LV1 . . . . .	10
3.1.3.1	Der Belichtungsmodus „Continuous-Path-Control“ (CPC) . . . . .	10
3.1.3.2	Die Wahl der Elektronenenergie . . . . .	11
3.1.4	Limitierungen der erzeugbaren Resistprofile . . . . .	13
3.1.5	Übertragung des Resistprofils in die Metallschicht . . . . .	14
3.1.6	Einfluß des Herstellungsprozesses auf die Gitterparameter . . . . .	18
3.1.6.1	Gitterperiode . . . . .	18
3.1.6.2	Profiltiefe und Aspektverhältnis . . . . .	18
3.1.6.3	Tastverhältnis . . . . .	19
3.1.6.4	Schlußfolgerungen . . . . .	22
3.2	Messung der Gittereigenschaften . . . . .	23
3.2.1	Notwendigkeit der Messungen . . . . .	23
3.2.2	Materialparameter und geometrische Parameter . . . . .	24
3.2.3	Optische Eigenschaften . . . . .	25
<b>4</b>	<b>Physikalische Modellierungsverfahren</b>	<b>28</b>
4.1	Übersicht . . . . .	28
4.2	Gittermodellierung mit der Effektiven-Medium-Theorie (EMT) . . . . .	29
4.2.1	Vollständige EMT . . . . .	29
4.2.2	Vereinfachte EMT . . . . .	30
4.3	Die Fourier-Entwicklungs-Methode . . . . .	31

4.3.1	Vorbemerkungen . . . . .	31
4.3.2	Grundlagen . . . . .	32
4.3.3	Berechnung für TE-Polarisation . . . . .	34
4.3.4	Berechnung für TM-Polarisation . . . . .	37
4.3.5	Numerische Durchführung . . . . .	39
<b>5</b>	<b>Modellierung der optischen Eigenschaften</b>	<b>40</b>
5.1	Einleitung . . . . .	40
5.2	Auswahl der Parameter . . . . .	40
5.3	Vergleich von rigorosen Berechnungen und Resultaten der EMT . . . . .	41
5.3.1	Normaler Polarisationsseffekt . . . . .	41
5.3.2	Inverser Polarisationsseffekt . . . . .	43
5.3.3	Grenzen der Aussagekraft der EMT . . . . .	45
5.4	Einfluß einzelner Parameter auf die optischen Eigenschaften . . . . .	47
5.4.1	Transmissionseffizienz und Polarisationsverhältnis . . . . .	47
5.4.2	Einfluß der normierten Gitterperiode . . . . .	48
5.4.3	Einfluß der Profiltiefe . . . . .	49
5.4.4	Einfluß der Wellenlänge . . . . .	53
5.4.5	Einfluß des verwendeten Metalls . . . . .	53
5.4.6	Inverser Effekt und Wood-Anomalien . . . . .	56
5.4.7	Abschließende Bemerkungen . . . . .	57
5.5	Schlußfolgerungen für die experimentelle Arbeit . . . . .	58
5.5.1	Materialauswahl . . . . .	58
5.5.2	Optimierung der Gitterparameter . . . . .	59
<b>6</b>	<b>Experimentelle Resultate</b>	<b>62</b>
6.1	Metallstreifengitter in Chrom . . . . .	62
6.1.1	Normaler Polarisationsseffekt . . . . .	62
6.1.1.1	Einfluß des Tastverhältnisses . . . . .	62
6.1.1.2	Diskussion möglicher Ursachen der Abweichungen . . . . .	63
6.1.1.3	Variation der Gitterperiode . . . . .	65
6.1.2	Wechsel zwischen normalem und inversem Polarisationsseffekt . . . . .	67
6.2	Inverser Polarisationsseffekt an Metallstreifengittern in Silber . . . . .	69
6.2.1	Übersicht . . . . .	69
6.2.2	Bestimmung der Tastverhältnisse . . . . .	69
6.2.3	Berücksichtigung der Beleuchtungsdivergenz . . . . .	71
6.2.4	Optische Eigenschaften . . . . .	72

6.3	Stark polarisierende Gitter mit abweichender Gittergeometrie . . . . .	74
6.3.1	Vorbemerkungen . . . . .	74
6.3.2	Herstellung . . . . .	74
6.3.3	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	76
6.4	Bewertung der experimentellen Ergebnisse . . . . .	78
<b>7</b>	<b>Technologische Einflüsse auf die Gitterqualität</b>	<b>80</b>
7.1	Einleitung . . . . .	80
7.2	Richtungsabhängige Dosisabweichungen . . . . .	81
7.3	Auswirkungen des Adressinkrements . . . . .	84
7.3.1	Auftretende Effekte . . . . .	84
7.3.2	Vermeidung des Effektes bei achsenparallelen Gittern . . . . .	87
7.3.3	Nicht-achsenparallele Gitter . . . . .	88
<b>8</b>	<b>Anwendungen</b>	<b>90</b>
8.1	Allgemeines . . . . .	90
8.2	Mikrooptisches Polarimeter . . . . .	90
8.3	Diffraktive Elemente mit Polarisationsmultiplexing . . . . .	91
<b>9</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>95</b>

# 1 Einführung

Die Verwendung von Mikrostrukturen in der Optik hat in den vergangenen Jahrzehnten eine immer größere Verbreitung erfahren und zu vielfältigen neuartigen Anwendungen und optischen Elementen geführt. Dieses Gebiet wird heute als Mikrooptik bezeichnet, wobei die genaue Definition und Abgrenzung der Begriffe „Mikrooptik“ bzw. „Mikrostruktur“ schwierig und nicht immer einheitlich ist. Die damit verbundenen Inhalte werden am besten anhand typischer Beispiele deutlich, wie Mikrolinsen und Mikrolinsenraster, Fresnelsche Zonenplatten, Beugungsgitter, Mikroprismen, computergenerierte Hologramme u.v.a.m.

Die Verbreitung und Anwendung derartiger Strukturen ging einher mit der Entwicklung ihrer Herstellungsverfahren. Hierzu zählt insbesondere die Mikrolithographie. Gegenwärtig haben verschiedene lithografische Methoden einen Stand erreicht, der sogar die Herstellung von Strukturen mit lateralen Abmessungen unterhalb der Wellenlänge des sichtbaren Lichtes ermöglicht. Diese sogenannten Subwellenlängenstrukturen weisen spezielle Eigenschaften auf, die sowohl ihre genaue Untersuchung als auch ihre Anwendung interessant machen. Beispielsweise ist es möglich, durch ein binäres dielektrisches Subwellenlängengitter einen Phasenunterschied zwischen den zwei Polarisationsrichtungen des auf das Gitter einfallenden Lichtes zu erzeugen. Dieser Effekt ist sehr ähnlich demjenigen bei Transmission durch einen doppelbrechenden Kristall, und man bezeichnet eine solche Struktur daher als „künstlich doppelbrechend“.

Man kann also bestimmte optische Effekte, die üblicherweise an spezielle Materialeigenschaften gebunden sind (z.B. an Anisotropie), auch durch Mikrostrukturierung von Grenzflächen im Subwellenlängenbereich realisieren. Neben den o.g. künstlich doppelbrechenden Strukturen sind dies z.B. Antirefleksstrukturen [1], polarisierende Elemente oder (in jüngster Zeit) photonische Kristalle [2]. Ein wesentlicher Vorteil der Mikrostrukturierung ist, daß die Strukturparameter mit hoher Ortsauflösung gezielt verändert bzw. moduliert werden können, so daß die laterale Variation der optischen Eigenschaften einen neuen Freiheitsgrad beim Design optischer Elemente oder Systeme bildet. Dieser zusätzliche Freiheitsgrad führt zum großen Interesse an der weiteren Untersuchung und Vervollkommenung optischer Subwellenlängenstrukturen.

Eine spezielle derartige Struktur stellen Subwellenlängen-Metallstreifengitter dar. Sie bestehen aus schmalen Metallstegen, die periodisch auf einem dielektrischen Substrat angeordnet sind, wobei die Periode kleiner als die Lichtwellenlänge ist. Solche Gitter weisen als eine sehr wesentliche und interessante Eigenschaft eine polarisationsabhängige Transmission auf. Dieser Effekt ist aus dem Bereich der Radio- und Mikrowellen bekannt, und man bezeichnet derartige Bauelemente als Metallstreifen-Polarisatoren (engl. „Wire Grid Polarizer“). Bereits von Heinrich Hertz wurde ein solches Element zur Polarisation von Radiowellen benutzt [3, 4].

Bei der Anwendung dieses Prinzips im sichtbaren Spektralbereich, die einen wesentlichen

Gegenstand der vorliegenden Dissertation bildet, ergibt sich die Frage, wie gut die optischen Eigenschaften polarisierender Metallstreifengitter sein können, welche Beschränkungen sich ergeben und woraus diese resultieren. Zur Beantwortung der Fragen erweist es sich als erforderlich, die Eigenschaften der Metallstreifengitter ausgehend von den Maxwell'schen Gleichungen theoretisch zu untersuchen, aber auch die Herstellungstechnologie der Gitter zu betrachten, die erreichbaren optischen Eigenschaften experimentell zu bestimmen und die Anforderungen potentieller Anwendungen zu berücksichtigen. Eine solche Vorgehensweise erlaubt, nicht nur die einzelnen genannten Aspekte zu untersuchen, sondern auch Querverbindungen herzustellen und somit ein Gesamtverständnis für die untersuchte Mikrostruktur zu entwickeln. Dies erfolgt in der vorliegenden Arbeit am Beispiel der Subwellenlängen-Metallstreifengitter. Darüber hinaus ergeben sich aber auch Schlußfolgerungen, die generell für die Mikrostrukturierung relevant sind.

Der Aufbau der vorliegenden Arbeit folgt weitgehend der beschriebenen Verbindung der verschiedenen Untersuchungsgebiete. Zunächst erfolgt in Kapitel 2 eine Einordnung in den gegenwärtigen Stand der Polarisationsbeeinflussung mit Mikrostrukturen. Anschließend werden Aufbau und wesentliche Parameter der hier untersuchten Gitter erläutert.

Die zur Herstellung der Gitterstrukturen benutzte Technologie ist Gegenstand des Kapitels 3. Dabei wird ausführlich auf die einzelnen Strukturparameter eingegangen, und es werden wesentliche Eigenschaften und Limitierungen beschrieben, die sich daraus für die Gitter ergeben. Das folgende Kapitel 4 behandelt die zur Modellierung der optischen Eigenschaften benutzten Verfahren. Neben der Effektiven-Medium-Theorie wird dabei vor allem die Fourier-Expansions-Methode beschrieben, die in der vorliegenden Arbeit hauptsächlich verwendet wurde.

In Kapitel 5 wird anhand von Modellrechnungen der Einfluß der verschiedenen Parameter auf die optischen Eigenschaften der Gitter untersucht. Damit ist ein Überblick über die vielfältigen Verhaltensweisen von Metallstreifengittern im sichtbaren Spektralbereich möglich, und spezielle Effekte (wie z.B. der inverse Polarisierungseffekt) lassen sich darin einordnen. Am Ende dieses Abschnittes werden unter Benutzung der in Kapitel 3 abgeleiteten Parameter Schlußfolgerungen zur experimentellen Arbeit gezogen.

Die Darstellung der experimentellen Ergebnisse ist Gegenstand von Kapitel 6. Sie werden zunächst für die verschiedenen Typen der hergestellten Gitter beschrieben. Anschließend erfolgt eine zusammenfassende Bewertung. Im Verlauf der experimentellen Arbeit zeigte sich, daß spezielle Effekte des Herstellungsprozesses die optischen Gittereigenschaften beeinflussen können. Diese Effekte werden im folgenden Kapitel 7 diskutiert und sind nicht nur für Metallstreifengitter, sondern generell bei der mikrolithografischen Gitterherstellung von Interesse.

Abschnitt 8 enthält einen Überblick über mögliche Anwendungen. Aus den Anforderungen der Anwendungen ergeben sich Rückschlüsse auf Design und Herstellungstechnologie der Gitter, was anhand zweier Beispiele gezeigt werden soll.

## 2 Grundlagen

### 2.1 Einordnung der vorliegenden Arbeit

#### 2.1.1 Der Metallstreifen-Polarisator

Bei der Ausbreitung ebener transversaler Lichtwellen in dielektrischen Medien sind die elektrischen bzw. magnetischen Feldstärkevektoren senkrecht zur Ausbreitungsrichtung orientiert, so daß im dreidimensionalen Raum zwei Dimensionen für die mögliche Lage dieser Vektoren verbleiben. Damit läßt sich jede ebene Welle in zwei voneinander unabhängige Anteile zerlegen, die als Polarisationsrichtungen bezeichnet werden und jeweils durch Amplitude und Phase charakterisiert werden können. Eine Veränderung (bzw. Beeinflussung) des Polarisationszustandes einer Lichtwelle bedeutet dann die Beeinflussung der Amplituden, der Phasen, oder beider Größen zugleich in unterschiedlicher Stärke für die beiden unabhängigen Polarisationsrichtungen.

Der Metallstreifen-Polarisator ist ein optisches Bauelement, mit dem eine solche Polarisationsbeeinflussung erfolgen kann. Er besteht aus einer periodischen Anordnung paralleler Metalldrähte. Wenn der Abstand der Drähte sehr klein gegen die Wellenlänge ist, wird aufgrund der guten Leitfähigkeit der Metalldrähte der Polarisationsanteil mit elektrischem Feld parallel zur Richtung der Drähte (TE-Polarisation) reflektiert, der Anteil mit elektrischem Feld senkrecht zur Richtung der Drähte (TM-Polarisation) transmittiert [3]. Daneben ergibt sich auch eine Beeinflussung der Phasen des transmittierten Lichtes, die jedoch für die Polarisationsfilterung nicht relevant ist.

Aufgrund der aus dem Radio- und Mikrowellenbereich bekannten günstigen Eigenschaften dieses Elements (nutzbar für unterschiedliche Einfallswinkel, relativ kompakt [5]) wurde versucht, das Prinzip des Metallstreifen-Polarisators bei immer kürzeren Wellenlängen  $\lambda$  anzuwenden, wobei man dazu überging, mit lithografischen Methoden geeignete Oberflächenstrukturen herzustellen [4]-[6]. Die einfachste denkbare Geometrie besteht dabei aus freistehenden metallischen Stegen auf einem ebenen dielektrischen Substrat, was im Rahmen dieser Arbeit als Metallstreifengitter bezeichnet werden soll.

Bei der Anwendung des Prinzips des Metallstreifen-Polarisators im nahen IR und insbesondere im sichtbaren Spektralbereich ergeben sich zwei grundsätzliche Probleme [7]:

- Die Realisierung von Perioden  $d$  des Metallstreifengitters mit  $d \ll \lambda$  ist schwierig. Daher muß untersucht werden, welchen Veränderungen sich für Perioden ergeben, die näher an  $\lambda$  bzw. in derselben Größenordnung liegen.
- Die Leitfähigkeit der Metalle ist im nahen IR bzw. im sichtbaren Spektralbereich nicht mehr perfekt. Der Einfluß dieser Tatsache ist ebenfalls zu untersuchen.

Die theoretische Behandlung dieser Probleme ging einher mit der Entwicklung der verschiedenen Modellierungsverfahren für diffraktive Strukturen. Yeh [8] untersuchte das Prinzip des



Metallstreifen-Polarisators auf der Basis der Effektiven-Medium-Theorie unter Berücksichtigung der begrenzten Leitfähigkeit. Die Entwicklung elektromagnetisch rigoroser Verfahren erlaubte die Berücksichtigung beider o.g. Einschränkungen [9]. Wesentliche rigorose Untersuchungen zum Metallstreifen-Polarisator wurden z.B. durch McPhedran et.al. [10], Lochbihler et.al. [11, 12] sowie Turunen et.al. [7] durchgeführt. Gegenwärtig ist die rigorose Modellierung von Metallstreifengittern mit vielen unterschiedlichen Verfahren möglich (vgl. Abschnitt 4.3.1).

Neben der Anwendung des Metallstreifen-Polarisators kann eine Polarisationsbeeinflussung auch durch andere Arten von Mikrostrukturen erreicht werden. Hierzu gab es in der Vergangenheit eine ganze Reihe von Arbeiten und Veröffentlichungen. Im sichtbaren Spektralbereich bzw. im nahen IR können beispielsweise dielektrische Subwellenlängen-Strukturen zur direkten Beeinflussung des Polarisationszustandes verwendet werden (z.B. [13]–[19]), es lassen sich aber auch komplexere polarisationsabhängige Anwendungen realisieren, wie polarisationsempfindliche Antirefektionsschichten [1], Schmalband-Resonanz-Filter [7, 20] oder polarisations-selektive computergenerierte Hologramme [21]. Daneben wurden auch Polarisationseffekte an massiv-metallischen Gittern mehrfach untersucht [18, 22, 23].

Die genaue Betrachtung der genannten Arbeiten zeigt, daß in vielen Fällen die optischen Eigenschaften sehr empfindlich von der genauen Einhaltung aller zugrundeliegenden Parameter abhängen. Schon kleine Abweichungen in den Abmessungen der Mikrostrukturen oder aber in den Beleuchtungsparametern (z.B. Verschiebungen in der Wellenlänge oder im Einfallswinkel) können zu wesentlichen Verschlechterungen der angestrebten Polarisationswirkung führen. Demgegenüber lassen die (für Wellenlängen im Radio- und Mikrowellenlängenbereich bekannten) Eigenschaften des Metallstreifen-Polarisators erwarten, daß die angestrebte Polarisationswirkung weitgehend unempfindlich gegenüber solchen Abweichungen ist. Diese hinsichtlich potentieller Anwendungen vorteilhafte Eigenschaft ist ein wesentlicher Grund für das Interesse, polarisierende Metallstreifengitter für den sichtbaren Spektralbereich zu untersuchen bzw. zu realisieren.

### **2.1.2 Bisherige experimentelle Arbeiten**

Eine Schwierigkeit bei der Herstellung von Metallstreifen-Polarisatoren für den sichtbaren Spektralbereich ist die Realisierung von genügend kleiner Gitterperioden (bei gleichzeitiger genügend großer Metalldicke, um die begrenzte Leitfähigkeit der Metalle zu kompensieren). Um dies zu erreichen, wurden bei den ersten experimentellen Arbeiten spezielle, teils vielstufige und komplizierte Herstellungsverfahren angewendet (u.a. Schattenbedampfung und profilselektives Ätzen [24, 25] oder Whiskerbildung bei schräger Metallbeschichtung [26]). Damit konnten beträchtliche Polarisationseffekte für Wellenlängen im sichtbaren Spektralbereich [25, 26] und sogar im UV-Bereich [27]–[29] erreicht werden.

Gleichzeitig erweisen sich jedoch die komplizierten Herstellungsverfahren als nachteilig bezüg-

lich der Reproduzierbarkeit der Gitterparameter und damit der optischen Eigenschaften (siehe insbes. [26]) sowie hinsichtlich der gezielten Variation der Polarisations-eigenschaften (Stärke oder Richtung des Polarisations-effekts), so daß der eingangs genannte Vorteil des zusätzlichen Freiheitsgrades beim Design optischer Elemente nicht ausgenutzt werden kann. Vielfach ist bereits die Bestimmung der genauen Gittergeometrie und der zugehörigen Parameter ein Problem (vgl. z.B. [24]), so daß ein Vergleich der optischen Eigenschaften mit theoretischen Werten sehr schwer ist (siehe [27]) bzw. teilweise gar nicht vorgenommen wurde.

Um diese Nachteile zu vermeiden, sollen im Rahmen der vorliegenden Arbeit Metallstreifengitter definierter binärer Geometrie mittels eines möglichst einfachen lithografischen Verfahrens hergestellt werden. Durch die definierte Gittergeometrie ist dann ein Vergleich zwischen theoretischer Modellierung und Experiment möglich. Die einfache Herstellungstechnologie erlaubt die Variation der geometrischen (und damit optischen) Eigenschaften und ist günstig hinsichtlich potentieller Anwendungen.

Neben der vorliegenden Arbeit existieren nach bisheriger Kenntnis zwei weitere Veröffentlichungen mit einem derartigen Ansatz. Stenkamp et al. [30] untersuchten die Polarisationswirkung binärer Metallstreifengitter in Wolfram bei  $\lambda = 670 \text{ nm}$  (Periode und Metalldicke je  $100 \text{ nm}$ ). Tamada et al. [31] verwendeten binäre Metallstreifengitter in Aluminium (Periode  $390 \text{ nm}$ , Dicke  $285 \text{ nm}$ ) bei  $\lambda = 780 \text{ nm}$ . In beiden Fällen konnte ein Polarisations-effekt nachgewiesen werden, Tamada et.al. erreichten bemerkenswerte optische Eigenschaften ( $\mathcal{P} \approx 700$  mit  $\eta_{\text{TM}} \approx 62\%$ , zur Definition der Größen s. Abschnitt 2.2.3). Zugleich ergibt sich jedoch in beiden Fällen ein Unterschied zwischen realisiertem und theoretisch erwartetem Polarisations-effekt von ein bis zwei Größenordnungen, dessen Ursache ungeklärt bleibt.

Ein systematischer Vergleich zwischen theoretischen und experimentellen Ergebnissen ist daher das zweite Anliegen der vorliegenden Arbeit.

## 2.2 Binäre Subwellenlängen-Metallstreifengitter

### 2.2.1 Aufbau der Gitter

Subwellenlängen-Gitter sind Gitter, deren Periode kleiner ist als die Wellenlänge des Lichtes im Vakuum. Im Unterschied hierzu stehen die Begriffe des „Single-Order“- bzw. „Zero-Order“-Gitters, bei denen nur eine propagierende Beugungsordnung (meistens die nullte Beugungsordnung) in Reflektion bzw. Transmission auftritt. Beide Gittertypen sind nicht identisch, denn für Subwellenlängen-Gitter kann es mehr als eine propagierende Beugungsordnung geben, da die Brechzahl des Substrates (oder auch des Superstrates) üblicherweise größer als eins ist, bzw. wenn ein nichtsenkrechter Einfall des Lichtes vorliegt. Typisches Beispiel eines „Zero-Order“-Gitters ist der klassische Metallstreifen-Polarisator, während die im Abschnitt 6.1.2

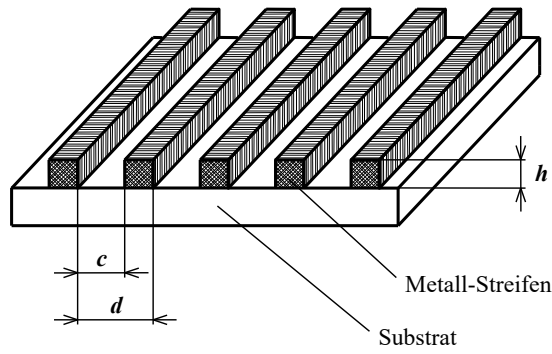


Abbildung 1: Binäres Metallstreifengitter (schematisch);  $h$ : Profiltiefe,  $d$ : Gitterperiode,  $c$ : Grabenbreite

behandelten Subwellenlängen-Gitter gerade den Grenzfall zwischen „Zero-Order“- und Nicht-„Zero-Order“-Bereich darstellen.

Die Bezeichnung „Metallstreifen-Gitter“ bedeutet, daß die Stege des Gitters aus einem metallischen Material mit komplexem Brechungsindex  $\hat{n}$  bestehen, während in alle anderen Bereichen rein dielektrische Materialien Verwendung finden. Die Profiltiefe des Gitters und die Dicke der Metallstreifen sind also miteinander identisch (vgl. Abb. 1). Als Substrat des Gitters wird meist Glas oder Quarz verwendet, Superstrat und Gittergräben bestehen üblicherweise aus Luft. Der Begriff „Metallstreifen-Gitter“ betont den Unterschied zu Gittern auf metallischen Substraten, die auch als massiv-metallische Gitter bezeichnet werden und nur in Reflexion nutzbar sind.

Um ein ideal binäres Metallstreifengitter handelt es sich, wenn die Gitterstege einen rechteckigen Querschnitt haben und homogen aus Metall bestehen. Dieser Fall wird bei der Modellierung der Gittereigenschaften im Rahmen der vorliegenden Arbeit immer angenommen. Bei der praktischen Herstellung der Gitter kann aber ein derartiger Aufbau nur *näherungsweise* realisiert werden. Die Abweichungen bestehen dabei zum einen in der Form der Gitterstege (z.B. trapezförmiger Querschnitt, Verrundung der Steg-Kanten, Rauigkeiten), andererseits auch in der Materialzusammensetzung der Gitterstege (Inhomogenitäten, Mischschichten). Diese Abweichungen stellen eine wesentliche potentielle Ursache für unterschiedliche Resultate in Experiment und Theorie dar. Sie werden daher an vielen Stellen der vorliegenden Arbeit konkret diskutiert. Eine zusammenfassende Betrachtung erfolgt in Abschnitt 6.4.

Aus den bisherigen Erläuterungen folgt, daß im Rahmen dieser Arbeit eine ganze Reihe von denkbaren Gittertypen nicht betrachtet werden, z.B. massiv-metallische Gitter, dielektrische Gitter auf metallischen Substraten, Gitter mit verschiedenen Metallen im Gitter- und Substratbereich, Gitter mit definiert nicht-binären Profilen (z.B. geblazte Gitter) oder Nicht-Subwellenlängen-Gitter. Der Ausschluß solcher Gitter ist willkürlich, denn auch mit derartigen Gittern lassen sich Polarisationseffekte realisieren. (Polarisationsfilterung an Nicht-Subwellenlängen-Gittern wird z.B. in [32] diskutiert.) Angesichts der Vielfalt der Gitterparameter und der

daraus resultierenden optischen Effekte ist jedoch eine Einengung der möglichen Parameter unumgänglich; im vorliegenden Fall konzentrieren wir uns auf die Untersuchung des Metallstreifen-Polarisators im sichtbaren Spektralbereich.

### 2.2.2 Geometrische Gittercharakterisierung

Die hier relevante Gittergeometrie wurde bereits schematisch in Abb. 1 gezeigt. Neben den Parametern Periode, Profiltiefe (bzw. Metalldicke) und Grabenbreite werden weitere Begriffe zur Charakterisierung solcher Gitter benutzt. Das Tastverhältnis soll im Rahmen dieser Arbeit definiert werden als Quotient aus Grabenbreite  $c$  und Periode  $d$ :

$$f = c/d. \quad (1)$$

Diese Definition ist nicht die einzig mögliche; in der Literatur wird auch  $(1 - f)$  oder das Verhältnis  $f/(1 - f)$  als Füllfaktor bzw. Tastverhältnis bezeichnet. Die Zuordnung der beiden Begriffe ist dabei nicht immer einheitlich, aber inhaltlich meist eindeutig. Im Rahmen dieser Arbeit wird durchgängig die obige Definition benutzt.

Bei der Herstellung von Mikrostrukturen bezeichnet man gewöhnlich das Verhältnis zwischen Strukturhöhe und kleinster lateraler Strukturabmessung als Aspektverhältnis  $\mathcal{A}$ . Für binäre Gitter gibt es genau zwei laterale Strukturabmessungen, die Grabenbreite  $c$  und die Stegbreite  $(d - c)$ . Somit ergibt sich für das Aspektverhältnis die Definition

$$\mathcal{A} = \begin{cases} h/c & \text{falls } f \leq 0.5 \\ h/(d - c) & \text{falls } f > 0.5 \end{cases}. \quad (2)$$

Im allgemeinen bereitet die Herstellung von Mikrostrukturen um so größere Schwierigkeiten, je höher das Aspektverhältnis ist. In der Definition 2 kommt dabei zum Ausdruck, daß sowohl ein sehr schmaler Graben im Gitter als auch ein sehr schmaler Steg zu einem hohen Aspektverhältnis führen kann. Insbesondere gilt dies auch für Gitter, deren Periode  $d$  deutlich größer als die Profiltiefe  $h$  ist, nämlich, falls das Tastverhältnis  $f$  sehr nahe an 0 oder 1 liegt.

Eine weitere wichtige Größe zur Charakterisierung von Subwellenlängengittern ist das Verhältnis zwischen Gitterperiode  $d$  und Lichtwellenlänge  $\lambda$ , das als normierte Gitterperiode

$$\mathcal{N} = \frac{d}{\lambda} \quad (3)$$

bezeichnet werden soll. Dabei bezieht sich der Begriff der Wellenlänge  $\lambda$  in der gesamten Arbeit auf den Wert im Vakuum bzw. in Luft.

### 2.2.3 Optische Gittercharakterisierung

Die Polarisationswirkung, die im Rahmen dieser Arbeit betrachtet werden soll, ist die unterschiedliche Transmission sichtbaren Lichtes durch das Subwellenlängen-Metallstreifengitter in

Abhängigkeit von der Polarisierung des einfallenden Lichtes. Bezeichnet man die beiden unabhängigen Polarisationsrichtungen als TE- und TM-Polarisation (zur genauen Definition siehe Abschnitt 4.3.2), so interessieren also die Effizienzen  $\eta_{\text{TE}}$  und  $\eta_{\text{TM}}$  der nullten transmittierten Beugungsordnung<sup>1</sup>. Der Quotient dieser beiden Größen ist das Polarisationsverhältnis

$$\mathcal{P} = \frac{\eta_{\text{TM}}}{\eta_{\text{TE}}} . \quad (4)$$

Diese Definition erfolgt davon ausgehend, daß für einen perfekten Metallstreifen-Polarisator die Transmission in TM nahezu 100% beträgt, während die TE-Transmission gegen 0 geht. Somit ergeben sich Polarisationsverhältnisse größer eins. Für den Fall, daß die TM-Transmission kleiner als die TE-Transmission ist (inverser Polarisierungseffekt), ergibt sich  $\mathcal{P} < 1$ .

Neben der Charakterisierung des Polarisierungseffektes durch  $\mathcal{P}$  werden auch die Größen Auslöschungs- bzw. Extinktionsverhältnis  $\mathcal{E}$  sowie Polarisationsgrad  $\mathcal{G}$  verwendet:

$$\mathcal{E} = \log(\mathcal{P}) , \quad (5)$$

$$\mathcal{G} = \frac{\eta_{\text{max}} - \eta_{\text{min}}}{\eta_{\text{max}} + \eta_{\text{min}}} . \quad (6)$$

Dabei ist  $\eta_{\text{max}}$  bzw.  $\eta_{\text{min}}$  die maximale bzw. minimale Transmission. Aus Gleichung 6 geht dabei jedoch nicht hervor, ob das Transmissions-Maximum für TE- oder TM-Polarisation erreicht wird, d.h. ob ein inverser oder normaler Polarisierungseffekt vorliegt<sup>2</sup>. In dieser Arbeit wird durchgängig das Polarisationsverhältnis  $\mathcal{P}$  verwendet. Eine Umrechnung auf den Polarisationsgrad ist dann leicht möglich gemäß

$$\mathcal{G} = \begin{cases} \frac{\mathcal{P}-1}{\mathcal{P}+1} & \text{falls } \mathcal{P} \geq 1 \quad (\text{normaler Polarisierungseffekt}) \\ \frac{1-\mathcal{P}}{1+\mathcal{P}} & \text{falls } \mathcal{P} < 1 \quad (\text{inverser Polarisierungseffekt}) \end{cases} . \quad (7)$$

Neben der bisher erwähnten Polarisationswirkung bezüglich der Transmissionseffizienzen kann auch eine Polarisationsbeeinflussung hinsichtlich unterschiedlicher Reflexionseffizienzen, oder aber die Beeinflussung der relativen Phasenlage von TE- und TM-Komponente in Transmission bzw. Reflexion (z.B. Umwandlung von linear polarisiertem in zirkular polarisiertes Licht) betrachtet werden [18, 22, 23, 33]. Dies ist jedoch nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit.

---

<sup>1</sup>Da ausschließlich die nullte Beugungsordnung betrachtet wird (selbst wenn eventuell höhere propagierende Beugungsordnungen existieren wie bei den in Abschnitt 6.1.2 behandelten Gittern), wird dies in den Formelzeichen für die Effizienz nicht extra kenntlich gemacht.

<sup>2</sup>Diese Unterscheidung könnte prinzipiell ermöglicht werden, indem in Gleichung 6 statt  $\eta_{\text{max}}$  immer  $\eta_{\text{TM}}$  und statt  $\eta_{\text{min}}$  immer  $\eta_{\text{TE}}$  verwendet wird; für den normalen Polarisierungseffekt wäre dann  $\mathcal{G} > 0$ , für den inversen  $\mathcal{G} < 0$ . Eine solche Definition ist aber nicht üblich, und der Informationsgehalt wäre nicht größer als bei Verwendung der Größe  $\mathcal{P}$ .

## 3 Herstellung und Charakterisierung der Gitter

### 3.1 Gitterherstellung

#### 3.1.1 Allgemeines

Die Herstellung der Subwellenlängen-Metallstreifengitter erfolgt mit Verfahren der Mikrostrukturierung. Sie läßt sich grundsätzlich in zwei wesentliche Abschnitte einteilen: a) die *Erzeugung* eines Gitterprofils (Resistmaske), und b) die *Übtragung* des Profils in die Metallschicht. Die folgende Beschreibung dieser beiden Schritte ist erforderlich, um wesentliche Eigenschaften und Einschränkungen zu verstehen, die sich daraus für die Metallstreifengitter ergeben. Eine Einordnung und ein Vergleich mit den vielfältigen alternativen Verfahren der Mikrostrukturierung ist anhand geeigneter Veröffentlichungen sowohl zur Mikrostrukturierung allgemein [34]–[38] als auch speziell zur Mikrostrukturierung für optische Bauelemente [39]–[41] möglich.

#### 3.1.2 Erzeugung des Gitterprofils

Die Erzeugung von Subwellenlängen-Gittern erfolgt gegenwärtig üblicherweise mit lithografischen Verfahren, d.h. eine auf dem zu strukturierenden Substrat befindliche Resistschicht wird durch elektromagnetische Strahlung oder Teilchenbeschuß partiell chemisch verändert (Belichtung des Resists), und durch diese Veränderung ist nachfolgend<sup>3</sup> ein selektives Entfernen bestimmter Resistbereiche möglich (Entwicklungsprozeß), so daß sich dann die Gitterstruktur im Resist herausbildet. Es werden gegenwärtig meist holografische Belichtungsverfahren [36, 42] oder die Elektronenstrahllithografie verwendet, wobei wesentliche Unterschiede existieren.

Beim holografischen Verfahren wird durch Interferenz (mindestens) zweier ebener Wellen ein ortsfestes Interferenzmuster erzeugt, das zur Resistbelichtung benutzt wird. Die Gitterparameter (insbesondere die Periode) sind damit durch den optischen Aufbau und die Belichtungswellenlänge weitgehend vorgegeben. Alle Gitterlinien werden gleichzeitig belichtet (paralleles Belichtungsverfahren), und die Größe der erzeugten Gitterstruktur hängt im wesentlichen nur von der nutzbaren Fläche des Interferenzmusters ab.

Bei der Elektronenstrahllithografie erfolgt die Belichtung durch einen fokussierten Elektronenstrahl, der nacheinander über alle zu belichtenden Bereiche der Resistschicht geführt wird (serielles Belichtungsverfahren). Die Gesamtbelichtungszeit hängt somit von der Größe der zu erzeugenden (Gitter-)Strukturen und der Belichtungsgeschwindigkeit ab, was u.U. eine deutliche Einschränkung bewirken kann. Andererseits erlaubt die Elektronenstrahllithografie prinzipiell eine problemlose Variation der Gitterparameter (insbesondere Periode, Tastverhältnis, Richtung

---

<sup>3</sup>Meist sind Belichtung und Entwicklung zwei getrennte Prozesse; in speziellen Fällen (z.B. Ablationsresists) erfolgt der Resistabtrag jedoch direkt während der Belichtung.

der Gitterlinien) nicht nur für verschiedene Gitter, sondern ggf. auch innerhalb einer Gitterstruktur. Diese große Variabilität ist für die hier herzustellenden Gitter von großem Vorteil, so daß die Elektronenstrahlolithografie zur Profilerzeugung benutzt wurde. Beschränkungen durch die geringe Belichtungsgeschwindigkeit mußten dabei in Kauf genommen werden. Die wesentlichen Parameter des verwendeten Lithografieprozesses waren:

- Belichtungsanlage: LION LV1 (Leica Microsystems Lithography Jena GmbH)
  - Elektronenenergie: 20 keV
  - Sondenstrom: 10 pA ... 100 pA
  - Durchmesser des fokussierten Elektronenstrahls: < 10 nm (Herstellerangabe)
  - Belichtungsstrategie: „Continuous-Path-Control“ (CPC)
  - max. Belichtungsgeschwindigkeit: 1 mm/s
- Resistprozeß:
  - Resist: AR-P 610 (PMMA-Copolymer)(Allresist GmbH, Berlin)
  - Entwickler: Methylisobutylketon:Isopropanol 1:3
  - Entwicklungszeiten: 15 s ... 300 s
  - Ultraschall-Unterstützung des Entwicklungsprozesses

Viele dieser Prozeßparameter sind nicht fest vorgegeben, sondern Ergebnis technologischer Optimierungen in Versuchsreihen. Das Gewinnen solcher Erfahrungen speziell für die Resisttechnologie ist ein teilweise mühsamer, aber notwendiger Prozeß, der hier nicht im Detail dargestellt werden soll. Allgemeine Angaben hierzu finden sich z.B. in [34, 43] und detaillierte Untersuchungen zum Verhalten verschiedener Resists des AR-P-Typs z.B. in [44]–[46].

### 3.1.3 Besonderheiten der Elektronenstrahlbelichtungsanlage LION LV1

#### 3.1.3.1 Der Belichtungsmodus „Continuous-Path-Control“ (CPC)

Der CPC-Modus ist eine spezielle Strategie zur Belichtung von geraden oder gekrümmten Linien, die besonders zur Herstellung von Gittern vorteilhaft ist. Im Unterschied zur sonst üblichen Belichtungsstrategie „Stop and Go“, bei der das zu belichtende Substrat feststeht und der Elektronenstrahl ausgelenkt wird, ist beim CPC-Modus der Elektronenstrahl fixiert,<sup>4</sup> und der Probenstisch mit dem darauf befindlichen Substrat wird auf einer vorgegebenen Bahn unter dem Elektronenstrahl entlangbewegt. Als Resultat entsteht im Resist eine belichtete Linie, deren Form der Bewegung (Bahnkurve) des Probenstisches entspricht, und deren Breite sowohl von den konkreten Belichtungsparametern als auch vom Entwicklungsprozeß abhängt. Bei diesem Verfahren entfällt die im „Stop and Go“-Modus nötige Aufteilung des zu belichtenden Bereiches

---

<sup>4</sup>In Wirklichkeit trifft dies nur näherungsweise zu, da der Elektronenstrahl zusätzlich ausgelenkt wird, um Positionsfehler der Probenstischbewegung in Echtzeit zu korrigieren. Diese Funktion wird „Strahlnachführung“ genannt.

in einzelne Arbeitsfelder, denn im CPC-Modus ist das Arbeitsfeld mit dem Gesamtfahrbereich des Probenstückes identisch (für LION LV1: ca. 160 mm × 160 mm). Somit wird prinzipiell das Auftreten von „Stitching Errors“ (Strukturfehler oder -versätze an Stoßstellen benachbarter Arbeitsfelder) vermieden, die eines der wesentlichen Probleme für die Strukturqualität in der Elektronenstrahlolithografie darstellen.

Im CPC-Modus erfolgt die Steuerung der Bewegung des Probenstückes über Bezierkurven [47]. Es werden rationale Bezierkurven mit 0 bis 2 Kontrollpunkten [48, 49] verarbeitet, was die Erzeugung gerader Linien beliebiger Richtung, aber auch verschiedenster gekrümmter Linien (Kreisen, Ellipsen, Parabeln oder Spiralen) gestattet. Beispielsweise können fokussierende Wellenleiter-Koppelgitter mit parabolischer Form der Gitterlinien durch dieses Verfahren mit hoher Qualität erzeugt werden [50, 51].

Die Genauigkeit der realen Belichtung der vorgegebenen Bezierkurve entspricht der Adressiergenauigkeit der Probenstück-Positionierung. Diese erfolgt getrennt in x- und y-Richtung in Inkrementen, deren Größe durch die Hardware der interferometrischen Positionsmessung und der zugehörigen Auswertelektronik vorgegeben ist. Diese Inkrementgröße war für die überwiegende Zahl der hergestellten Gitterstrukturen [52]:

$$G = \frac{632.99144... \text{ nm}}{64} = 9.8904913... \text{ nm} \quad (8)$$

Die reale Bahnkurve des Probenstückes ist eine Projektion der vorgegebenen Bezierkurve auf ein virtuelles orthogonales Raster<sup>5</sup> mit der Rasterperiode  $G$ . Die vielfach verwendete Angabe eines „10 nm-Inkrementes“, die auch häufig der Erstellung der Belichtungsdaten zugrunde gelegt wird, ist somit nur näherungsweise richtig. Die Auswirkungen des virtuellen Schreibrasters auf die Qualität der hergestellten Gitter werden in Abschnitt 7.3 diskutiert.

### 3.1.3.2 Die Wahl der Elektronenenergie

Bei der Arbeit mit dem LION LV1 kann die Primärelektronenenergie  $E_0$  zwischen 0.5 keV und 20 keV gewählt werden. Die Nutzung von Elektronenenergien unterhalb ca. 5 keV stellt ein spezielles Gebiet der Elektronenmikroskopie bzw. -lithografie dar, den sogenannten „Low-Energy“- bzw. „Low-Voltage“-Bereich [36, 53]. In diesem Bereich ist die Eindringtiefe der Elektronen in ein Material (Resist) bzw. das resultierende Wechselwirkungsvolumen sehr klein, was einen starken Einfluß auf den sogenannten Proximity-Effekt hat.

Der Proximity-Effekt entsteht, weil die Elektronen beim Eindringen in den Resist ihre Energie nicht schlagartig an der Resistoberfläche abgeben, sondern während vieler einzelner Wechselwirkungsprozesse entlang der zurückgelegten Bahn des Elektrons im Resist [54]. Die summarische Belichtungswirkung vieler Elektronen erfolgt also in einem gewissen Volumenbereich um

---

<sup>5</sup>Diese Projektion der vorgegebenen Bahn auf ein festes Raster wird oft als „Hardclipping“ bezeichnet.



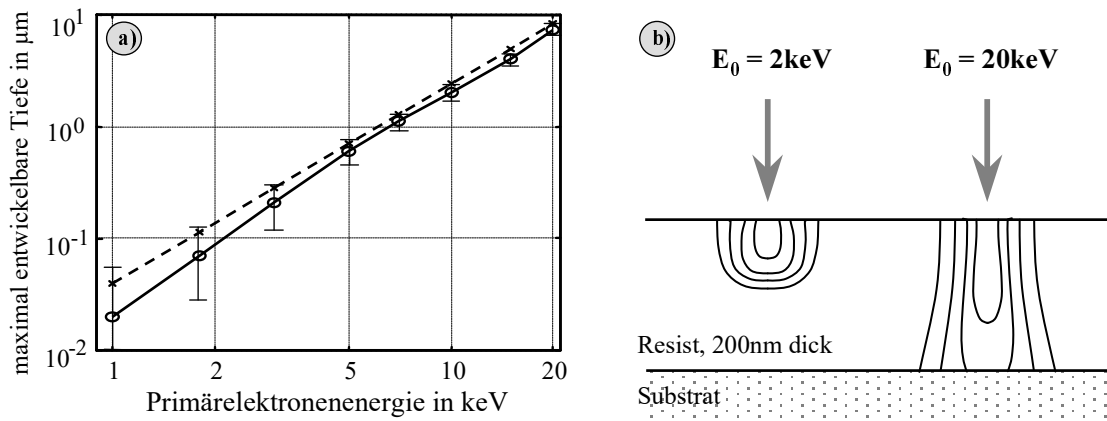


Abbildung 2: a) maximal entwickelbare Profiltiefe in PMMA-Resist (durchgezogen) sowie Elektronenreichweite nach Gleichung (2.3) in [55] (gestrichelt); b) unterschiedliche Profilform belichteter Linien (für verschiedene Entwicklungszeiten, schematisch) in 200 nm Resist bei 2 keV bzw. 20 keV Primärelektronenenergie

den Auftreffpunkt des Elektronenstrahls herum (Wechselwirkungsvolumen). Dies führt zu einer merklichen gegenseitigen Beeinflussung von nahe beieinander liegenden belichteten Strukturen, woraus sich der Name „Proximity-Effekt“ ableitet. Dieser Effekt ist ein wesentliches Hindernis bei der elektronenstrahlolithografischen Strukturierung, so daß in der Vergangenheit viele Untersuchungen hierzu vorgenommen wurden (siehe z.B. [55]) und inzwischen mehrere kommerzielle Programmpakete zur (zumindest lateralen) Korrektur dieses Effektes existieren.

Die Reichweite der Elektronen im Resist und damit auch die Reichweite des Proximity-Effektes ist stark von der Primärelektronenenergie  $E_0$  abhängig. Abb. 2a zeigt Meßwerte zur maximal entwickelbaren Tiefe von Resistprofilen bei verschiedenen Elektronenenergien, die aus Belichtungen mit dem LION LV1 bestimmt wurden. Die gestrichelte Kurve in Abb. 2a zeigt als Vergleich Werte für die mittlere totale Bahnlänge der Elektronen (Elektronenreichweite nach Bethe), die nach der Näherungsformel (2.3) in [55] berechnet wurden. Obwohl diese Formel streng nur für Energien  $E_0 \gtrsim 10$  keV anwendbar ist, zeigt das Diagramm die recht gute Übereinstimmung zwischen maximaler Elektronenreichweite und maximal entwickelbarer Profiltiefe sowie die starke Verkürzung beider Größen für kleine  $E_0$ .

Da die Reichweite des Proximity-Effektes wesentlich durch die Elektronenreichweite bestimmt wird, liegt sie für  $E_0 \lesssim 2$  keV in derselben Größenordnung wie die lateralen Abmessungen der hier herzustellenden Strukturen ( $\sim 100$  nm) bzw. ist noch kleiner (vgl. Abb. 2a). Die Anwendung von sehr kleinen  $E_0$  wäre also vorteilhaft, da der Proximity-Effekt keinen wesentlich störenden Einfluß mehr für die Strukturierung darstellen würde. Dieser Vorteil der „Low-Energy“-Lithografie wurde tatsächlich für verschiedene Anwendungen gezeigt [56, 57].

Für die hier herzustellenden Strukturen ist die Verwendung kleiner  $E_0$  jedoch aus einem anderen Grund nachteilig. Die Ursache hierfür ist die Form der herstellbaren Resistprofile, die in

Abb. 2b schematisch für  $E_0 = 2 \text{ keV}$  und  $E_0 = 20 \text{ keV}$  wiedergegeben ist. Diese Profilform ergibt sich aus der Form des Wechselwirkungsvolumens der Elektronen im Resist, die von  $E_0$  abhängt und z.B. durch Monte-Carlo-Simulationen [58] recht gut modelliert werden kann, sowie dem nachfolgenden Einfluß des Entwicklungsprozesses. Im Resultat sind die herstellbaren Resistprofile für kleine  $E_0$  immer näherungsweise kugelförmig, d.h. ihre Breite liegt in derselben Größenordnung wie die Strukturtiefe. Mit anderen Worten: für sehr kleine  $E_0$  ist das Aspektverhältnis begrenzt auf  $\mathcal{A} \lesssim 1$ . Für  $E_0 = 20 \text{ keV}$  sind dagegen Resiststrukturen mit Aspektverhältnissen deutlich größer als eins erzeugbar, insbesondere falls der Entwicklungsprozeß in dem Moment gestoppt wird, in dem die Entwicklungsfront gerade die Grenzfläche zum Substrat erreicht hat, der Resist also gerade durchentwickelt ist.

Die Erzeugung von Resiststrukturen mit Aspektverhältnissen deutlich größer als eins setzt also die Verwendung großer Elektronenenergien voraus. Spezielle Techniken, die die Erzeugung von Resiststrukturen mit  $\mathcal{A} > 1$  auch für kleine  $E_0$  ermöglichen, wie z.B. das „Surface-Imaging“-Verfahren [56] oder die Verwendung von Mehrlagenresists, standen entweder nicht zur Verfügung oder sollten wegen ihrer relativen technologischen Kompliziertheit (viele Prozeßschritte) möglichst vermieden werden. In Abschnitt 5.5.2 wird gezeigt, daß zum Erreichen eines möglichst starken Polarisierungseffektes in vielen Fällen ein möglichst großes Aspektverhältnis der Metallstruktur nötig ist. Im Abschnitt 3.1.6 wird gezeigt, daß ein hohes Aspektverhältnis im Metall nur durch eine Resistmaske mit noch höherem Aspektverhältnis realisierbar ist. Insgesamt ist damit zur Herstellung der Metallstreifengitter die maximale zur Verfügung stehende Primärelektronenenergie  $E_0 = 20 \text{ keV}$  am besten geeignet. Der bei dieser Energie auftretende Proximity-Effekt wurde in Kauf genommen. Er wirkt sich bei den sehr regelmäßigen Gitterstrukturen nur im Randbereich merklich aus, so daß eine Proximity-Korrektur nicht durchgeführt werden mußte.

### 3.1.4 Limitierungen der erzeugbaren Resistprofile

Für die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Resisttechnologie ergab sich die experimentell stabil (d.h. reproduzierbar) erreichbare Grenze der herstellbaren Aspektverhältnisse bei  $E_0 = 20 \text{ keV}$  zu ungefähr

$$\mathcal{A}_{\max} \approx 3. \quad (9)$$

Dieser Wert ist dabei nicht absolut konstant, sondern auch noch von der Periode abhängig. Abb. 3a zeigt den Zusammenhang zwischen minimal erzeugbarer Linienbreite  $c$  im Resist und Resistdicke  $h$ . Da die genaue Definition einer „reproduzierbar“ erreichbaren Minimalbreite schwierig ist, sind die aufgetragenen Werte keine exakt meßbaren Werte, sondern Erfahrungswerte aus der experimentellen Arbeit. Durch die Angabe von ungefähren Fehlergrenzen wurde dies im Dia-

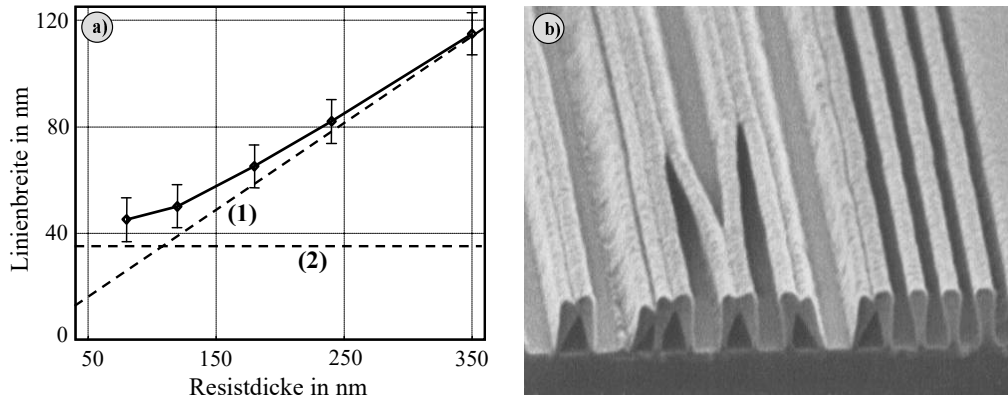


Abbildung 3: a) durchgezogen: minimal realisierte Linienbreite für binäre Subwellenlängengitter in Resist in Abhängigkeit von der Resistdicke; Kurve (1): Begrenzung durch Aspektverhältnis  $\mathcal{A} = 3$ ; Kurve (2): Auflösungsbegrenzung des Lithografieprozesses (nur qualitativ eingezeichnet, die genaue Lage dieser Grenze wurde nicht ermittelt); b) Kollaps der Resiststruktur nach dem Entwicklungsprozeß ( $d = 300$  nm,  $h = 400$  nm)

gramm deutlich gemacht. Man kann erkennen, daß für den hier relevanten Bereich  $h \gtrsim 150$  nm die Begrenzung weitgehend durch das Aspektverhältnis  $\mathcal{A}_{\max} \approx 3$  (Linie (1) in Abb. 3a) vorgegeben ist. Die absolute Auflösungsbegrenzung der benutzten Technologie wird erst für kleinere Profiltiefen bzw. Perioden bestimmend. Das erzeugbare Aspektverhältnis ist dabei begrenzt, weil die Resiststege bei zunehmender Höhe immer instabiler werden und während des Entwicklungsprozesses umfallen bzw. zusammenklappen können. Abb. 3b zeigt ein Beispiel für diese Erscheinung, genauere Untersuchungen zum Mechanismus wurden z.B. in [59] durchgeführt.

Es soll noch einmal hervorgehoben werden, daß die hier angegebene Limitierung keine absolute Grenze darstellt, sondern für die Erzeugung von Gittern mit  $d \lesssim 400$  nm Periode mit Hilfe der beschriebenen Technologie gilt. Bei der Erzeugung von *Einzelstrukturen* können mit ähnlichen Technologien minimale Linienbreiten von ca. 25 nm und Aspektverhältnisse bis zu  $\mathcal{A} \approx 10$  erreicht werden [44]. Da derartige Einzelstrukturen aber in einer ansonsten ungestörten massiven Resistschicht erzeugt werden, ergeben sich naturgemäß andere Herstellungsgrenzen als bei der extrem kurzperiodischen Anordnung von Resistgräben, wie sie ein Subwellenlängengitter darstellt.

### 3.1.5 Übertragung des Resistprofils in die Metallschicht

Resultat des Belichtungs- und Entwicklungsprozesses ist ein weitgehend binäres Resistprofil (Abb. 4a). Der Transfer dieses Profils in eine Metallschicht kann durch Trockenätzen oder durch das „Lift-off“-Verfahren erfolgen<sup>6</sup>.

<sup>6</sup>Diese beiden Technologien entsprechen den gegenwärtigen Möglichkeiten am IAP der FSU. Prinzipiell sind auch andere Verfahren verwendbar, z.B. naßchemisches Ätzen oder Galvanisierung.

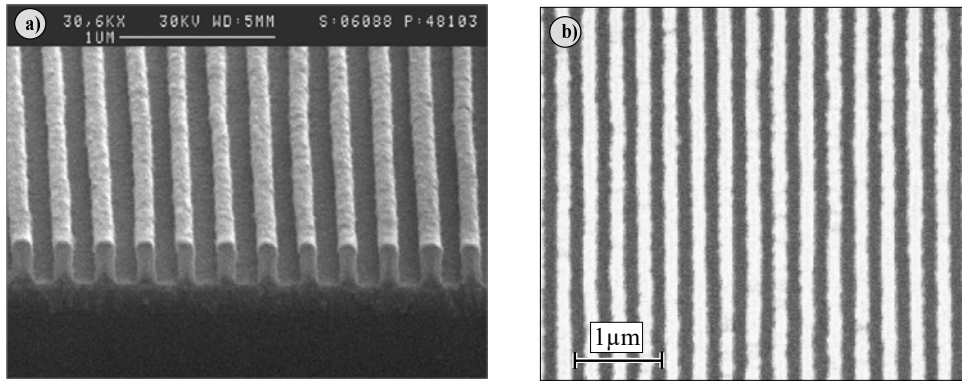


Abbildung 4: REM-Aufnahmen von hergestellten Gitterstrukturen, a) Gitter in Resist mit  $d = 270$  nm,  $h = 300$  nm,  $f = 0.5$ ; b) Gitter in Chrom mit  $d = 300$  nm,  $h = 35$  nm,  $f = 0.5$

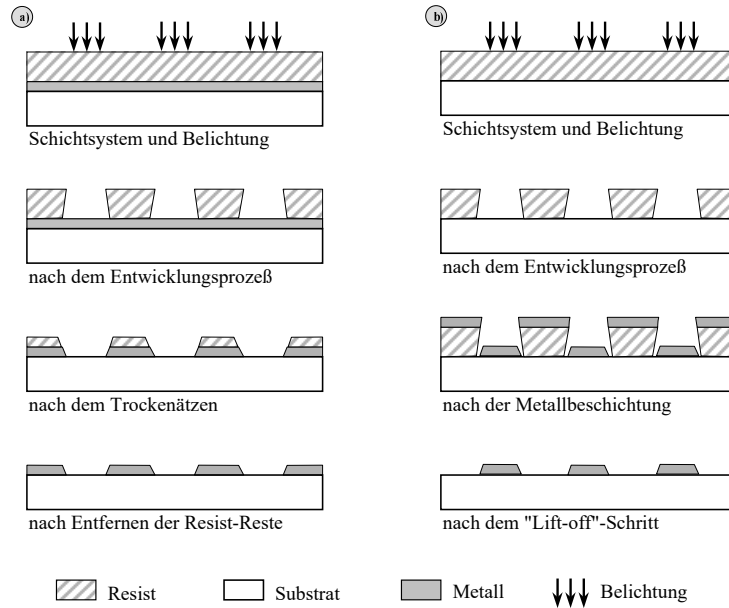


Abbildung 5: Ablauf des Herstellungsprozesses von Metallstreifengittern bei Nutzung des Trockenätzens (a) bzw. des „Lift-off“-Verfahrens (b)

Für das Trockenätzen oder Ionenstrahlätzen muß sich unter der Resistschicht bereits die zu strukturierende Metallschicht befinden. Im Ätzprozeß werden die freiliegenden (d.h. nicht durch den Resist maskierten) Bereiche der Metalloberfläche mit einer Ätzrate  $R_{\text{Metall}}$  abgetragen. In den mit Resist maskierten Bereichen bleibt das Metall unbeeinflusst, dort wird jedoch der Resist durch den Ionenstrahl ebenfalls abgetragen mit der Ätzrate  $R_{\text{Resist}}$ . Ist die Dicke der Resistmaske ausreichend groß, kann in den unmaskierten Bereichen die gesamte Metallschicht entfernt werden, bevor der Resist in den maskierten Bereichen verbraucht ist. Die wesentlichen Herstellungsschritte zeigt noch einmal Abb. 5a, für nähere Details sei z.B. auf [36, 38] verwiesen.

Beim „Lift-off“-Verfahren (Abb. 5b) erfolgt die Herstellung der Resiststruktur zunächst auf einem nicht mit Metall beschichteten dielektrischen Substrat. Dann wird das Resistprofil mit

Metall beschichtet und anschließend der Resist mit einem organischen Lösungsmittel entfernt. Dabei werden auch alle Teile der zuvor aufgetragenen Metallschicht wieder entfernt, die sich auf dem Resist befinden. Nur das Metall mit direktem Kontakt zum Substrat (in den Gräben der Resiststruktur) wird in diesem „Lift-off“-Schritt nicht abgelöst, so daß sich ein Metallstreifengitter ergibt. Dabei entstehen die Metallstreifen (Stege) dort, wo sich in der ursprünglichen Resiststruktur die Gräben befanden. Demzufolge vertauschen sich Grabenbreite  $c$  und Stegbreite  $d-c$ , und für das Tastverhältnis gilt gemäß der anfangs gegebenen Definition  $f_{\text{Metall}} = 1 - f_{\text{Resist}}$ . Das Trockenätzen weist gegenüber dem „Lift-off“-Verfahren einige Vorteile auf:

- Die Metallschicht wird zu Beginn des Herstellungsprozesses auf ein speziell gereinigtes Substrat aufgebracht (damit gute Voraussetzungen für eine homogene, defektfreie Beschichtung);
- die homogene Metallschicht bildet gleichzeitig die für die Elektronenstrahlbelichtung notwendige Leitschicht zur Verhinderung der Substrataufladung (beim „Lift-off“-Verfahren muß diese zusätzlich aufgebracht und nach der Belichtung wieder entfernt werden);
- beim Trockenätzen sind sowohl exakt binäre als auch leicht trapezoidale oder leicht hinterschnittene Resistprofile als Ätzmaske verwendbar, beim „Lift-off“-Verfahren ist dagegen ein (möglichst stark) hinterschnittenes Resistprofil notwendig.

Daher wurde generell dem Trockenätzen der Vorzug vor dem „Lift-off“-Verfahren gegeben. Es wurden üblicherweise die folgenden Prozeßparameter benutzt [60]:

- Ionenstrahlätzanlage: Oxford Microfab 300 (Oxford Plasma Techn., Yetton, GB)
- Ionenart: Argon-Ionen
- Ionen-Energie: 400 eV
- Ionen-Stromdichte:  $\approx 350 \mu\text{A}/\text{cm}^2$
- Ätzrate für Resist  $R_{\text{Resist}} \approx 35 \dots 40 \text{ nm}/\text{min}$  (bei senkrechtem Einfall)
- Ätzrate für Chrom  $R_{\text{Chrom}} \approx 20 \dots 25 \text{ nm}/\text{min}$

Die angegebene Ätzrate  $R_{\text{Resist}}$  gilt dabei für große laterale Resistflächen bei senkrechtem Auftreffen des Ionenstrahls. Wird die Resistoberfläche schräg zum Ionenstrahl ausgerichtet, ergibt sich eine teilweise beträchtliche Veränderung [38]. Die stärkste Erhöhung ergibt sich für einen Winkel von ca.  $55^\circ$  [60], die effektiv wirksame Ätzrate ist dabei

$$R_{\text{Resist,max}} \approx 3 \cdot R_{\text{Resist}} \quad (10)$$

für die oben angegebenen Parameter. Im Fall von Strukturkanten ist dieser Effekt von wesentlicher Bedeutung. Im Verlauf des Ätzprozesses bildet sich hier nämlich automatisch die geneigte Oberfläche mit der höchsten Ätzrate heraus, was als Facettierungseffekt (Abb. 6a) bezeichnet wird [38]. Während der Effekt für einzelne Kanten korrigiert werden kann, indem die Lage der

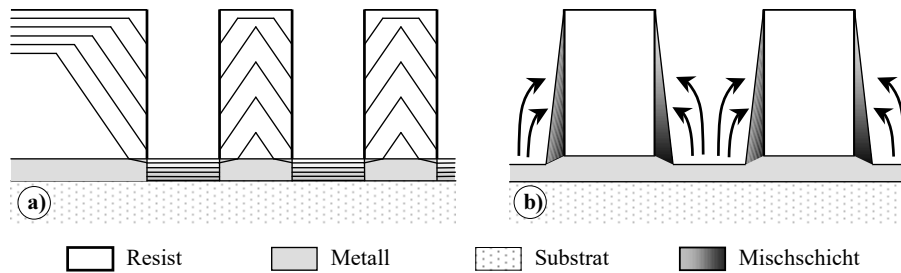


Abbildung 6: a) Facettierungseffekt beim Trockenätzen: Oberfläche des Resist- und Metallprofils nach verschiedenen Ätzzeiten (schematisch); b) Redepositionseffekt: Wiederanlagerung von Metallteilchen an die Seitenwände des Resistprofils (schematisch)

Resistkante im voraus etwas verändert wird, ist eine solche Korrektur für schmale Resiststege (siehe Abb. 6a rechts) nicht möglich. Bei Subwellenlängengittern muß somit die Dicke der Resistschicht entsprechend  $R_{\text{Resist}, \text{max}}$  gewählt werden.

Ein weiterer störender Effekt ist die Redeposition abgetragener Metallteilchen an den Seitenwänden des Resistprofils (Abb. 6b). Die angelagerten Teilchen bilden zusammen mit den angrenzenden Resistteilchen eine Mischschicht, die sehr stabil und damit schwer entfernbar ist [38]. Derartige Schichten können eine merkliche Beeinträchtigung der optischen Gittereigenschaften bewirken. Ihre Entstehung kann nicht völlig verhindert werden. Ein partielles Entfernen solcher Schichten ist möglich, indem eine zusätzliche, nur ca. 10 nm dünne Aluminium-Schicht zwischen Chromschicht und Resistschicht angeordnet wird. Nach dem Ätzprozeß kann diese Aluminiumschicht durch naßchemisches Ätzen selektiv entfernt werden. Dabei werden sowohl Reste der Resistmaske als auch ein Großteil der an den Strukturkanten entstandenen Mischschichten mit entfernt.

Facettierungs- und Redepositionseffekt treten im realen Ätzprozeß gleichzeitig auf und bewirken, daß das entstehende Metallstreifengitter nicht ideal binär ist, sondern insbesondere im Randbereich der Stege eine komplexe Oberfläche und Materialzusammensetzung aufweist. Die genaue Vorhersage dieser Eigenschaften (wie auch der damit verbundenen Änderung des Tastverhältnisses gegenüber der Resiststruktur, siehe Abschnitt 3.1.6) ist derzeit nicht möglich. Die resultierende Abweichung der realen Metallstreifengitter vom ideal binären Profil führt aber zu merklichen Veränderungen der optischen Eigenschaften, was im Zusammenhang mit den experimentellen Ergebnissen diskutiert wird (siehe insbesondere Abschnitt 6.4).

Im Verlauf der experimentellen Arbeiten stellte sich heraus, daß der Ätzprozeß für verschiedene Metalle unterschiedlich gut beherrschbar ist. Während beim Ätzen von Chrom-Schichten mit der am IAP der FSU vorhandenen Technologie meist gute Ergebnisse erzielt wurden (Abb. 4b), ergaben sich erhebliche Probleme bei Aluminium oder Silber. Als Ursache kommen sowohl starke Redeposition während des Ätzprozesses als auch chemische Veränderungen des Resists durch

Eindiffusion von Metallionen in Frage. Obwohl derartige Prozesse prinzipiell bekannt sind [61], ist die endgültige Klärung solcher technologischer Probleme sehr schwierig und eine Ursache dafür, daß in der Herstellungstechnologie möglichst bekannte stabile Materialien verwendet werden. Im vorliegenden Fall wurde daher meist Chrom verwendet. Einige Metallstreifengitter in Silber wurden mit dem „Lift-off“-Verfahren hergestellt.

### 3.1.6 Einfluß des Herstellungsprozesses auf die Gitterparameter

Aus den vorangegangenen Abschnitten ergibt sich, daß der Herstellungsprozeß der Gitter aus vier *wesentlichen* Schritten besteht: Beschichten (Metallschicht und Resist), Elektronenstrahl-Belichtung, Entwicklung des Resists sowie Strukturübertragung durch Trockenätzen (bzw. „Lift-off“, wobei sich dabei die Reihenfolge der Schritte etwas ändert). Für die geometrischen Gitterparameter  $d$ ,  $h$ ,  $f$  ergibt sich eine unterschiedliche Beeinflussung in jedem dieser Schritte.

#### 3.1.6.1 Gitterperiode

Die Periode  $d$  wird wesentlich durch die Belichtung bestimmt, nämlich durch den Abstand der im CPC-Modus sukzessive belichteten Gitterlinien. Der Abstand zwischen zwei Linien kann nur mit der Genauigkeit der Tischpositionierung, d.h. auf die Größe des Adressinkrements  $G$  von rund 10 nm genau eingehalten werden. Bezogen auf den Abstand zweier benachbarter Linien ergibt sich der relative Fehler

$$\Delta d = G/d. \quad (11)$$

Da der absolute Positionierungsfehler aber unabhängig von der Anzahl der belichteten Gitterlinien ist, ergibt sich der relative Fehler der über  $N$  Gitterlinien gemittelten Gitterperiode

$$\Delta \bar{d} = G/(N \cdot d). \quad (12)$$

In allen anderen Prozeßschritten bleibt die Gitterperiode praktisch unbeeinflusst, wenn nicht sehr grobe Fehler (wie z.B. partielle Resistablösung oder große Temperaturunterschiede zwischen den verschiedenen Technologieschritten) vorkommen.

#### 3.1.6.2 Profiltiefe und Aspektverhältnis

Die Profiltiefe des Metallgitters wird beim Aufbringen der metallischen Schicht auf das Substrat durch die Schichtdicke vorgegeben. Beim Beschichten durch Sputtern beträgt die Genauigkeit ungefähr  $\pm 5\%$  [60]. Diese Dicke wird durch Belichtung und Entwicklung des Resists nicht beeinflusst. Auch im Ätzprozeß bleibt die Metalldicke in den maskierten Bereichen konstant, falls die Resistschicht eine wirksame Maskierung im gesamten Ätzprozeß garantiert. Im Fall des „Lift-off“-Verfahrens ergibt sich ebenfalls keine Änderung, da die Metallbeschichtung direkt vor dem Resist-Ablösen erfolgt.

Die Profiltiefe der binären Resiststruktur wird durch die Schichtdicke beim Belacken vorgegeben, diese kann bei Schleuderbelackung üblicherweise auf 3% genau eingehalten werden [62]. Vernachlässigt man kleine Dickenänderungen des Resists durch thermische Belastung beim Belichten bzw. durch die Nullöserate des unbelichteten Resists beim Entwickeln, bleibt die Resistdicke konstant, bis der Resist im Ätz- bzw. „Lift-off“-Schritt als Nutzschicht verbraucht wird.

Die mindestens benötigte Dicke der Resistmaske für den Ätzprozeß resultiert aus dem Verhältnis der Ätzraten des Resists  $R_{\text{Resist}}$  und des zu strukturierenden Metalls  $R_{\text{Metall}}$ :

$$h_{\text{Resist}} = \frac{R_{\text{Resist}}}{R_{\text{Metall}}} \cdot h_{\text{Metall}} . \quad (13)$$

Das Ätzratenverhältnis  $R_{\text{Resist}}/R_{\text{Metall}}$  ergibt sich aus den in Abschnitt 3.1.5 genannten Parametern zu ungefähr 2. Wegen des bereits erwähnten Facettierungseffektes ist aber im vorliegenden Fall die effektiv wirksame Ätzrate  $R_{\text{Resist,max}}$ . Dies muß in Gleichung 13 berücksichtigt werden und führt dann unter Verwendung der Werte aus Abschnitt 3.1.5 zu

$$h_{\text{Resist}} = \frac{R_{\text{Resist,max}}}{R_{\text{Metall}}} \cdot h_{\text{Metall}} \approx (5.5 \pm 0.5) \cdot h_{\text{Metall}} . \quad (14)$$

Dieses Ergebnis ist auch experimentell gestützt, denn die Verwendung wesentlich dünnerer Resistmasken als angegeben führt zu einer unvollständigen Profilübertragung (Metallschicht kann nicht durchgeätzt werden) bzw. zu einer großflächigen Schädigung der gesamten Metallschicht durch den flächigen Einfluß des Ätzprozesses nach vollständigem Abtrag der Resistmaske [38, 60].

Die Betrachtung zeigt, daß die Dicke der als Ätzmaske benutzten Resistschicht ungefähr 6 mal so groß sein muß wie die Metallschichtdicke, um eine sichere Erzeugung der Subwellenlängen-Metallstreifengitter zu ermöglichen. Hieraus kann auch das maximal erzeugbare Aspektverhältnis des Metallstreifengitters abgeschätzt werden. Unter der Annahme, daß sich das Tastverhältnis bei der Profilübertragung Resist-Metall nicht ändert, verhalten sich die Aspektverhältnisse der Resist- bzw. Metallstruktur wie die zugehörigen Schichtdicken. (Die Annahme eines unveränderten Tastverhältnisses ist zwar — wie unten dargelegt wird — nicht zutreffend, aber in grober Näherung erfüllt, und soll für diese *Abeschätzung* zur Vereinfachung der Überlegungen benutzt werden.) Mit dem in Gleichung 9 genannten Wert  $\mathcal{A}_{\text{Resist,max}}$  ergibt sich:

$$\mathcal{A}_{\text{Metall,max}} = \mathcal{A}_{\text{Resist,max}} \cdot \frac{h_{\text{Metall}}}{h_{\text{Resist}}} \approx \frac{3}{5.5} \approx 0.5 . \quad (15)$$

Diese aus der detaillierten Betrachtung der einzelnen Prozeßschritte gewonnene Erkenntnis über die Limitierung des herstellbaren Aspektverhältnisses wird in Abschnitt 5.5.2 benötigt, um das Polarisationsverhalten der experimentell hergestellten Gitter zu optimieren.

### 3.1.6.3 Tastverhältnis

Für das Tastverhältnis bzw. die Grabenbreite ergibt sich eine große Vielfalt potentieller Einflussfaktoren in allen Herstellungsschritten.



Im **Belichtungsprozeß** können Veränderungen in der Belichtungsdosis<sup>7</sup> oder im Fokussdurchmesser des Elektronenstrahls eine Veränderung der Breite der belichteten Spur im CPC-Modus (und damit eine Änderung der Linienbreite nach dem Entwicklungsprozeß) bewirken. Eine Veränderung des Fokussdurchmessers während der Belichtung kann durch sorgfältige experimentelle Arbeit (genaue Justierung des Elektronenstrahls vor der Belichtung, Messung der Ebenheit der Substratoberfläche) weitgehend ausgeschlossen werden. In der Belichtungsdosis kann es aber bei längeren Belichtungszeiten ungewollte Veränderungen geben, da der Sondenstrom des Elektronenstrahls über mehreren Stunden eine Drift von einigen Prozent (abhängig vom Gerätezustand) aufweisen kann. Solche Driften bewirken unmittelbar Veränderungen des Tastverhältnisses.

Die Beeinflussung des Tastverhältnisses im nachfolgenden Entwicklungsprozeß sowie bei der Strukturübertragung in die Metallschicht soll anhand eines Beispiels (Meßreihe von mehreren Gittern mit  $d = 300$  nm,  $h_{\text{Resist}} = 250$  nm,  $h_{\text{Metall}} = 40$  nm) diskutiert werden. Die o.g. ungewollte Verfälschung des Tastverhältnisses durch Fokusveränderungen bzw. Driften im Sondenstrom kann hier ausgeschlossen werden, da die Gitterflächen sehr klein und die Belichtungszeiten somit sehr kurz (1 bis 2 Minuten) waren. Es wurde aber eine gezielte Variation der Belichtungsdosis vorgenommen, um die Linienbreite bzw. das Tastverhältnis zu steuern.

Die Meßwerte für Linienbreite bzw. Tastverhältnis, die sich als Resultat des **Entwicklungsprozesses** in der Resistschicht ergaben, zeigt Abb. 7a. Diese Meßwerte wurden mittels REM ermittelt. Dabei wurde das Resistprofil an einer Bruchkante untersucht (analog zu Abb. 4a), so daß Meßwerte sowohl an der Oberfläche des Resists (Kurve (1) in Abb. 7a) als auch an der unteren Grenzfläche zur Metallschicht (Kurve (2) in Abb. 7a) ermittelt werden konnten. Der Vergleich beider Kurven zeigt, daß ein hinterschnittenes Profil der Gitterlinien vorliegt; der Hinterschnitt wird mit zunehmender Dosis stärker. Für die kleinste realisierte Dosis waren die Gräben des Gitterprofils noch nicht vollständig durchentwickelt, so daß sich für diesen Meßwert in Kurve (2) eine sichtbare Abweichung ergibt.

Während die Meßwerte der Kurven (1) und (2) einer Entwicklung bei Normtemperatur (21.5°C) entsprechen, wurde ein weiteres Gitter bei einer abweichenden Temperatur des Entwicklers von 24.5°C entwickelt. Den deutlichen Einfluß dieser Änderung zeigen die Kurven (1\*) und (2\*), die in allen anderen Parametern analog zu den vorherigen Kurven sind. Durch die höhere Temperatur verläuft der Entwicklungsprozeß generell schneller. Insbesondere ist für Liniendosen  $D_l \geq 98.5$  pAs/mm die gesamte Resistschicht abgelöst (keine Gitterstruktur mehr vorhanden, dementsprechend  $f = 1$ ).

Neben diesem Beispiel für den Einfluß der Temperatur auf den Entwicklungsprozeß existieren viele weitere Einflußfaktoren (wie z.B. Konzentration und Wassergehalt des Entwicklers),

---

<sup>7</sup>Im CPC-Modus wird die Belichtungsdosis als Liniendosis angegeben.

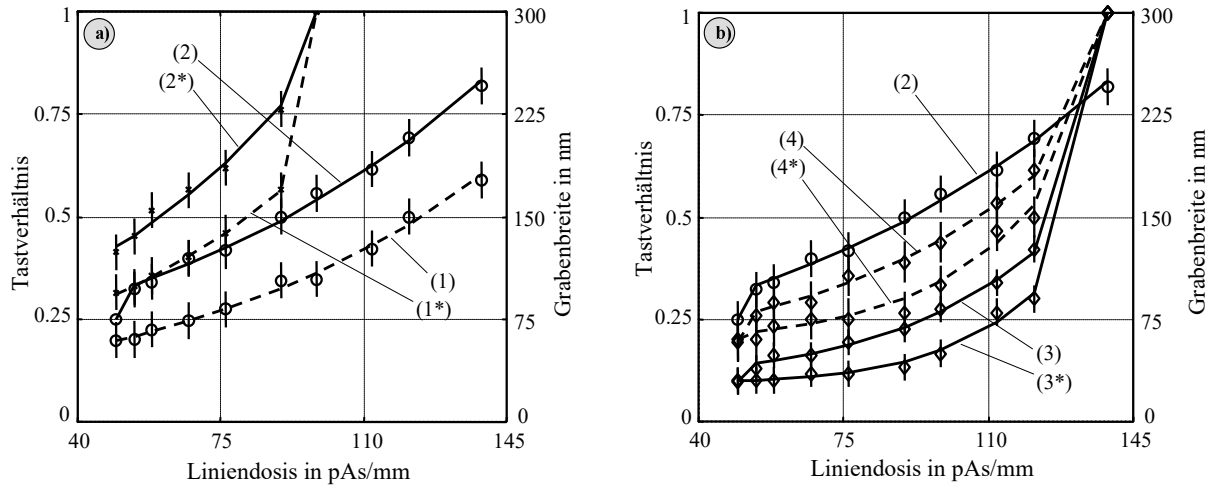


Abbildung 7: a) Tastverhältnis bzw. Linienbreite im Resist (Gitter mit  $d = 300$  nm), und zwar (1) gemessen an der Resistoberfläche, (2) gemessen an der Resist-Metall-Grenzfläche, (1\*) und (2\*): wie (1) bzw. (2), aber Entwickler-Temperatur 3K erhöht; b) Änderung des Tastverhältnisses beim Trockenätzen, und zwar (1) Kurve aus a) zum Vergleich, (3) direkt gemessene Grabenbreite (Ätzeit 4 min), (4) Grabenbreite korrigiert mit Übergangsbereich, (3\*) und (4\*): wie (3) bzw. (4), aber Ätzeit 5 min statt 4 min

die weder als vollkommen konstant angenommen werden können noch (mit den zur Verfügung stehenden Mitteln) genau genug bestimmbar sind. Die exakte Kontrolle des Tastverhältnisses im Resist durch Einhalten einer vorgegebenen Entwicklungszeit war deshalb im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht möglich.

Als Lösung dieses Problems wurde der Entwicklungsprozeß in mehreren Teilschritten durchgeführt und der Entwicklungszustand dabei jeweils kontrolliert. Eine direkte Vermessung des Tastverhältnisses von Subwellenlängengittern im optischen Mikroskop ist jedoch nicht möglich, und die Vermessung im REM analog zu Abb. 4 führt zur Beschädigung bzw. Zerstörung der Gitterstruktur. Daher wurde die Kontrolle des Entwicklungszustandes anhand von Vergleichsstrukturen vorgenommen, die im optischen Mikroskop untersucht werden konnten. Mit einem solchen indirekten Kontrollverfahren kann nur eine begrenzte Genauigkeit erreicht werden (im vorliegenden Fall meist  $\Delta f = \pm 0.05$ ), aber unter den gegebenen technologischen Rahmenbedingungen erwies sich das geschilderte Verfahren als befriedigender Kompromiß.

Die Gitterstruktur wurde anschließend durch **Ionenstrahlätzen** in die unter dem Resist befindliche Chromschicht übertragen, wobei die Parameter des Resistprofils den Kurven (1) bzw. (2) entsprachen (Entwicklung bei  $21.5^\circ\text{C}$ ). Die Vermessung der resultierenden Metallstreifen erfolgte wiederum im REM. Eine genaue Bestimmung der Profilform durch seitliche Betrachtung einer Bruchfläche (wie beim Resistprofil) war jedoch nicht möglich, da bei der Chromdicke von nur 40 nm im rasterelektronenmikroskopischen Bild keine eindeutige Bestimmung der Profilkanten-

ten mehr möglich ist. Stattdessen wurden die Gitter im REM senkrecht von oben untersucht, wobei die Metallstreifen und Gräben als Bereiche unterschiedlicher Helligkeit analog zu Abb. 4b erkennbar sind. Die homogen dunklen Bereiche entsprechen den Gittergräben, in denen die Metallschicht durch das Ätzen vollständig entfernt ist. Die Breite dieser Bereiche nach dem Ätzen unter Standardbedingungen (Ätzzeit 4 Minuten) zeigt Kurve (3) in Abb. 7b. (Als Vergleich zum Resist ist Kurve (2) ebenfalls eingetragen.)

Im Helligkeitsverlauf solcher REM-Bilder ist erkennbar, daß der Übergang vom Graben zum Gittersteg nicht abrupt ist (entsprechend einem ideal binären Gitter), sondern daß ein Übergangsbereich existiert. Für die vorliegenden Gitter konnte die Breite dieser Übergangsschicht aus dem Helligkeitsverlauf abgeschätzt werden. Wird dieser Übergangsbereich jeweils zur Hälfte dem Gittersteg und dem Gittergraben zugerechnet, ergibt sich eine korrigierte Grabenbreite entsprechend Kurve (4). Der starke Unterschied zwischen den Kurven (3) und (4) zeigt die Schwierigkeit, die tatsächlich realisierten Gitter mit dem Modell des binären Metallstreifengitters zu beschreiben. Dieses Problem ergab sich für alle im Rahmen der vorliegenden Arbeit hergestellten Metallstreifengitter. Bei der Besprechung der experimentellen Resultate wird darauf noch konkret eingegangen (insbesondere in Abschnitt 6.2.2), eine Zusammenfassung erfolgt in Abschnitt 6.4.

Wie der Vergleich von Kurve (2) mit Kurve (3) bzw. (4) zeigt, wird das Tastverhältnis beim Ionenstrahlätzen kleiner. Dieser Effekt verstärkt sich, wenn die Ätzzeit erhöht wird (Kurven (3\*) und (4\*) für eine Ätzzeit von 5 Minuten statt 4 Minuten). Die Ursache hierfür ist somit vermutlich der bereits erwähnte Redepositionseffekt, der mit zunehmender Ätzzeit stärker wird. Umgekehrt ist auch eine Vergrößerung des Tastverhältnisses durch den Rückzug der Resistkante beim Facettierungs-Effekt denkbar. Welcher der beiden Effekte überwiegt, hängt von den konkreten Ätzbedingungen ab und kann nicht allgemein vorhergesagt werden. Das in Abb. 7b gezeigte Verhalten ist somit nur ein Beispiel. Über das bisher geschilderte Verhalten hinaus ergeben sich weitere mögliche Beeinflussungen durch Veränderungen in Geräteparametern der beim Trockenätzen benutzten Anlagen.

Ähnliche Verhältnisse ergeben sich, wenn zum Strukturtransfer statt des Ionenstrahlätzens das „Lift-off“-Verfahren benutzt wird. (Beispielsweise kann dabei eine Änderung des Tastverhältnisses aus dem allmählichen Zuwachsen der Gräben in der Resistmaske während der Metallüberschichtung resultieren.) Insgesamt erfolgt also auch beim Strukturtransfer eine deutliche Beeinflussung des Tastverhältnisses, wobei die auftretenden Effekte (genau wie beim Entwicklungsprozeß) oftmals nur eingeschränkt quantitativ erfaßbar bzw. reproduzierbar sind.

### 3.1.6.4 Schlußfolgerungen

In der folgenden Tabelle wird die bisherige Darstellung noch einmal zusammengefaßt.

Technologieschritt	Beeinflussung bzw. Veränderung von:		
	Periode $d$	Profiltiefe $h$	Tastverhältnis $f$
Beschichtung	nein	ja	nein
Belichtung	ja	nein	ja
Entwicklung	nein	nein	ja
Strukturübertragung	nein	nein	ja

Diese ja/nein-Aussagen sind dabei eine vereinfachende Zusammenfassung der oben detaillierter dargestellten Zusammenhänge. Sie zeigen aber als wesentlichen Fakt, daß Periode und Profiltiefe jeweils in nur einem Prozeßschritt signifikant beeinflußt werden.

Für das Tastverhältnis ergeben sich dagegen folgende Gesichtspunkte:

- Das Tastverhältnis wird in nahezu allen Prozeßschritten der Herstellung (bis auf das Beschichten, siehe Tabelle) signifikant beeinflußt.
- In jedem einzelnen Schritt erfolgt die Beeinflussung durch eine ganze Reihe von äußeren Parametern. Die quantitative Ermittlung der Beeinflussung ist fast immer schwierig. In vielen Fällen ist sogar die qualitative Vorhersage der Veränderung schwierig, da gegenläufige Effekte existieren.
- Die Bestimmung des Tastverhältnisses ist nicht immer eindeutig und erfordert relativ aufwendige Verfahren (siehe hierzu Abschnitt 3.2.2).
- Die Analyse des optischen Verhaltens von Subwellenlängen-Metallstreifengittern (Kapitel 5) zeigt, daß das Tastverhältnis bestimmend für die optischen Eigenschaften (sowohl für die Transmissionseffizienzen als auch für das Polarisationsverhältnis) ist. Kleine Veränderungen von  $f$  können deutliche Veränderungen von  $\mathcal{P}$ , unter Umständen z.B. den Umschlag vom normalen zum inversen Polarisationsseffekt bewirken.

Somit erweist sich das Tastverhältnis als Schlüssel zur möglichst guten und reproduzierbaren Realisierung von Polarisationsseffekten an Subwellenlängen-Metallstreifengittern.

## 3.2 Messung der Gittereigenschaften

### 3.2.1 Notwendigkeit der Messungen

Die optischen Messungen an den hergestellten Gittern entsprechen dem eingangs formulierten Ziel, unabhängig von der theoretischen Modellierung Aussagen über die tatsächlichen Gittereigenschaften zu gewinnen. Daneben ist es aber auch erforderlich, die geometrischen Parameter und die Materialeigenschaften der realen Metallstreifengitter zu überprüfen, weil mit der verfügbaren Herstellungstechnologie nicht von vornherein garantiert werden kann, daß sie im Herstellungsprozeß auch tatsächlich eingehalten werden. Im Ergebnis dieser Messungen kann

einerseits die Herstellungstechnologie optimiert werden. Andererseits lassen sich in der Kombination aller Messungen die Parameter und Eigenschaften des Gitters soweit bestimmen, daß der beabsichtigte systematische Vergleich zwischen Experiment und Modellierung möglich wird.

Im Verlauf der experimentellen Arbeit stellte sich heraus, daß die genügend genaue Messung bestimmter Größen (z.B. der Materialeigenschaften, s. folgender Abschnitt) teilweise schwierig oder derzeit gar nicht möglich ist. In diesem Fall können aber aus den meßbaren Größen sowie den Ergebnissen der Modellierung zumindest qualitative Rückschlüsse auf die nicht zugänglichen Parameter gezogen werden.

### 3.2.2 Materialparameter und geometrische Parameter

Eine quantitative Bestimmung der Materialeigenschaften (d.h. Brechzahlen) in den einzelnen Bereichen des Gitters, insbesondere des Metalls in den Gitterstegen, ist aufgrund der Kleinheit der Strukturen gegenwärtig unmöglich. Im vorliegenden Fall beschränkte sich die direkte Kontrolle der Materialeigenschaften daher darauf festzustellen, ob im Gitter tatsächlich ein Wechsel zwischen metallischen Gitterstegen und nichtmetallischen Gittergräben realisiert wurde. Mit Hilfe des Rasterelektronenmikroskops kann dies durch Augenschein qualitativ festgestellt werden, d.h. es ist erkennbar, ob ein Gitter möglicherweise Mängel aufweist, wie z.B. eine nicht durchgeätzte Metallschicht (Metall auch noch in den Gittergräben), eine Überätzung (Metallische Stege nicht mehr homogen, teilweise oder vollständig abgelöst) oder eine extreme Unsauberkeit der Probenoberfläche (metallische oder nichtmetallische Partikel über die gesamte Probenoberfläche verteilt). Derartige Strukturen liefern keine *reproduzierbaren* optischen Eigenschaften und wurden daher im Rahmen dieser Arbeit nicht ausgewertet.

Günstigere Verhältnisse ergeben sich bei der Bestimmung der geometrischen Gitterparameter. Die Periode  $d$  ist durch den Lithografieprozeß sehr genau bestimmt (vgl. Abschnitt 3.1.6). Falls eine Überprüfung trotzdem notwendig erscheint, kann diese zusammen mit der Messung des Tastverhältnisses (s.u.) erfolgen. Die Profiltiefe  $h$  ist für ideal-binäre Gitter mit der Metallschichtdicke identisch. Eine Bestimmung der Metallschichtdicke ist z.B. anhand der gemessenen Transmission der Schicht möglich, falls die Brechzahl der Metallschicht bekannt ist. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden hierfür die Werte für massives Metall benutzt. Dies stellt eine Näherung dar, die durchgeführten Experimente ergaben aber keinen Hinweis darauf, daß diese Näherung (für die homogene Schicht) evtl. unzulässig bzw. zu grob wäre. Die Überprüfung, ob Metallschichtdicke und Profiltiefe übereinstimmen (oder ob z.B. beim Ätzen der Metallschicht auch eine oberflächliche Strukturierung des Substrates erfolgte), kann in Zusammenhang mit der Bestimmung des Gitterprofils erfolgen.

Von den geometrischen Eigenschaften verbleiben somit die Messung des Tastverhältnisses (bzw. der Steg- oder Grabenbreite) sowie die Kontrolle des Gitterprofils. Hierfür werden Meß-

verfahren mit sehr hoher Ortsauflösung benötigt. Gängige Verfahren sind vor allem die Verwendung von „Atomic-Force“-Mikroskopen (AFM) oder Raster-Elektronen-Mikroskopen (REM). Daneben existieren auch spezielle optische Verfahren zur Vermessung von Subwellenlängengittern [63]-[66]. Letztere erfordern allerdings immer gewisse Vorkenntnisse bzw. Annahmen über das zu vermessende Profil, so daß sie nicht als alleiniges Untersuchungsverfahren verwendet werden können. Aus diesem Grund und wegen des Aufwandes, der zur Adaption für das vorliegende Problem nötig wäre, wurden diese Verfahren nicht weiter verfolgt.

Die Strukturkontrolle mittels AFM wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit bei einzelnen Proben angewendet. Als nachteilig erwies sich vor allem, daß die Vermessung von Profilen mit hohem Aspektverhältnis (z.B. Resiststrukturen wie in Abb. 4a) nur unvollständig bzw. gar nicht möglich ist, und daß das gemessene Profil nahezu keine Aussagen über die Anordnung der Materialbereiche im Gitter gibt (z.B. Gitter nicht durchgeätzt oder bereits überätzt), so daß zur Interpretation der Vergleich mit anderen Meßverfahren nötig ist.

Hauptsächlich wurden die hergestellten Strukturen daher mit dem REM untersucht. Als wesentlicher Vorteil erweist sich, daß bei geeigneter Präparation (Herstellung von Bruchkanten, vgl. Abb. 3b und 4a) die Messung *aller* geometrischen Gitterparameter ( $d$ ,  $h$  und  $c$  bzw.  $f$ ) gleichzeitig und darüber hinaus die Überprüfung des Gitterprofils und des qualitativen Zustands der Gitter (Mischschichten, Verunreinigungen, Ätzzustand, Homogenität etc.) möglich ist. Jedoch hat auch die Verwendung des REMs einige Nachteile:

- die Erzeugung glatter Bruchkanten kann schwierig sein, z.B. auf dicken Glassubstraten;
- eine zur REM-Untersuchung durchgebrochene Probe ist meist nicht weiter verwendbar;
- oft ist das Aufbringen einer dünnen Leitschicht nötig, um die Aufladung der Probe bei der REM-Untersuchung zu verhindern, diese Schicht kann die geometrischen Parameter verfälschen und ist u.U. schwierig wieder zu entfernen;
- die Präparation und Untersuchung erfordert relativ viel Zeit.

Somit ist auch die Rasterelektronenmikroskopie nicht das ideale Verfahren, aber unter den verschiedenen (hier teils nicht genannten) Möglichkeiten das günstigste.

### 3.2.3 Optische Eigenschaften

Die Bestimmung der Polarisationsseigenschaften der hergestellten Gitter erfordert die sehr genaue Messung der Transmissionseffizienzen für TE- und TM-Polarisation, wobei das beleuchtende Licht vollständig linear polarisiert sein muß und die Beeinflussung des Polarisationszustandes bzw. der Lichtintensität durch andere Komponenten des optischen Aufbaus (außer den zu vermessenden Gittern) verhindert werden muß. Zusätzlich zu diesen allgemeinen Forderungen ergab sich in der vorliegenden Arbeit generell die Schwierigkeit, daß die Fläche der zu vermessenden

Gitter sehr klein war (meist  $100\text{ }\mu\text{m} \times 100\text{ }\mu\text{m}$ ). Dies ist eine Folge der (relativ) langsamen Arbeitsgeschwindigkeit der Elektronenstrahlbelichtungsanlage LION LV1, die wiederum durch das (serielle) Belichtungsverfahren CPC bedingt ist.

Die genauen Vermessung derartig kleiner Gitter erfolgte im Rahmen der vorliegenden Arbeit mit Hilfe eines Mikroskopes. Verwendet wurde dabei:

- Mikroskop „JenaPol“, Objektiv Planachromat 3.2fach oder 10fach;
- Lichtquelle „Narva HLWS5“ 6V 25W (Weißlicht, eingebaut), ggf. spektrale Filterung über Interferenzfilter;
- drehbarer Folienpolarisator (eingebaut) mit Polarisationsverhältnis besser als 100:1;
- CCD-Detektor „RJM JenaCam 21“ mit angeschlossenem externen PC mit *Frame-Grabber*-Karte und Auswertungsprogramm „CCD-Kamera“.

Während der experimentellen Arbeit stellte sich heraus, daß dieses Verfahren sowohl günstige als auch nachteilige Eigenschaften aufweist. Vorteile waren:

- Vorliegen eines genau justierten, gegen Dejustierung weitgehend unempfindlichen Versuchsaufbaus mit definierten optischen Eigenschaften;
- genaue Positionierbarkeit der kleinen Gitterflächen relativ zum Detektor und exzellente Kontrolle hierüber über Okular bzw. Bildschirm des PC;
- hierdurch Möglichkeit, kleine Störungen oder Verunreinigungen in den Gitterflächen gezielt von der Vermessung auszuschließen;
- Vermessung sowohl mit Weißlicht als auch mit weitgehend monochromatischem Licht verschiedener Wellenlängen möglich (abhängig von den vorhandenen Interferenzfiltern);
- keine störenden Interferenzen innerhalb des optischen Aufbaus, da kein vollständig monochromatisches Licht verwendet wurde.

Als Nachteile erwiesen sich:

- Begrenzter Dynamikbereich des CCD-Detektors (prinzipiell 3 Größenordnungen, davon nur ca. 1.5 Größenordnungen nutzbar wegen Rauschens);
- Beleuchtung nicht völlig kollimiert, da Eingangsblende nicht völlig geschlossen werden kann (minimale Divergenz ca.  $\pm 5^\circ$ );
- Beeinflussung durch Streulicht sowie Reflexe innerhalb des fest vorgegebenen Strahlengangs im Mikroskop;
- merkliche Eigenpolarisation des Mikroskops durch geneigte optische Grenzflächen (Prismen, Teilerspiegel) im fest vorgegebenen Strahlengang.

Von den genannten Nachteilen sind vornehmlich die ersten beiden unabänderlich. Die Beeinflussung durch Streulicht und Reflexe konnte durch sorgfältiges experimentelles Arbeiten nahezu vollständig vermieden werden. Die Eigenpolarisation des Mikroskops wurde kompensiert, indem jeweils zwei völlig unabhängige Messungen mit um  $90^\circ$  veränderter Orientierung der Probe (parallel bzw. senkrecht zur Richtung der Eigenpolarisation) vorgenommen wurden und der Mittelwert der Ergebnisse gebildet wurde.

Die Divergenz der Beleuchtung von ca.  $\pm 5^\circ$  ist relativ klein und kann als Überlagerung ebener Wellen mit verschiedenen Einfallswinkeln angesehen werden. Die rigorose Modellierung zeigt, daß der Einfluß des Einfallswinkels für Metallstreifengitter in dünnen Metallschichten nur marginal ist, so lange die normierte Gitterperiode genügend weit vom Rayleigh-Punkt  $\mathcal{N} = 1/n_{\text{Substrat}}$  entfernt ist (vgl. Abschnitt 5.4.7). Für die in Abschnitt 6.1.1 beschriebenen Experimente zum normalen Polarisationsseffekt konnte die Divergenz daher durch einfache Mittelwertbildung von Resultaten für  $0^\circ$  und  $5^\circ$  Einfallswinkel berücksichtigt werden. Bei den Experimenten zum inversen Polarisationsseffekt wurden aber Gitterperioden benutzt, die relativ nahe am bzw. genau auf dem Rayleigh-Punkt lagen. Der Einfluß der Divergenz muß dann jeweils konkret überprüft und in der Modellierung berücksichtigt werden.

Die optische Untersuchung der meisten Gitter wurde mit dem geschilderten Versuchsaufbau vorgenommen. Im Falle sehr hoher Polarisationsverhältnisse war dies jedoch nicht mehr möglich, da der Dynamikbereich der CCD-Kamera nicht ausreichend war und darüber hinaus eine merkliche Beeinflussung durch Streulicht vorlag, was eine reproduzierbare Bestimmung der (hier *sehr* geringen) Minimaltransmissionen verhinderte. Als Alternative wurde ein spezieller optischer Aufbau mit einem Laser ( $\lambda = 633 \text{ nm}$ ) als Lichtquelle sowie einem Leistungsmesser mit hoher Dynamik (Optometer S370) als Detektor benutzt. Die Vermessung der optischen Gittereigenschaften mit diesem Aufbau erforderte aber einen signifikant höheren experimentellen Aufwand (u.a. Erhöhung der Fläche der zu vermessenden Gitter auf  $0.1 \text{ mm}^2$ ), so daß dieses Verfahren nur angewendet wurde, wenn die prognostizierten optischen Eigenschaften dies unbedingt erforderten.



## 4 Physikalische Modellierungsverfahren

### 4.1 Übersicht

Zur Modellierung optischer Gitter gibt es eine große Vielfalt theoretischer Ansätze. Bei der Auswahl der konkreten Methode spielt die normierte Gitterperiode  $\mathcal{N}$ , d.h. das Verhältnis zwischen Gitterperiode  $d$  und Wellenlänge  $\lambda$ , eine entscheidende Rolle [67].

Rigorese Theorien, bei denen Licht als elektromagnetische Welle durch dreidimensionale Vektorfelder beschrieben wird, können prinzipiell in allen Fällen angewendet werden. Ausgangspunkt solcher Modelle sind dabei die klassischen Maxwell-Gleichungen. Es sind aber auch einfachere Ansätze möglich, falls  $\mathcal{N} \gg 1$  oder  $\mathcal{N} \ll 1$  ist. Für  $\mathcal{N} \gg 1$  gelangt man in den Bereich der skalaren Theorie, bei der die Beschreibung der Ausbreitung des Lichtes mit (gegenüber der rigorosen Theorie vereinfachten) skalaren Ansätzen erfolgt. Für  $\mathcal{N} \ll 1$  kann das Gitter als homogenes „effektives“ Medium beschrieben werden [7]; dieser Ansatz wird als „Effektive-Medium-Theorie“ (EMT) bezeichnet. Anschaulich gesprochen, ist hier die Gitterstruktur viel feiner als die Lichtwellenlänge und kann also vom Licht nicht „aufgelöst“ werden.

In der Literatur finden sich viele Arbeiten, in denen die EMT zur Modellierung von dielektrischen oder metallischen Subwellenlängen-Gittern benutzt wird, z.B. [1, 7, 8, 10, 68]. Speziell interessant ist die bereits in Abschnitt 2.1.1 genannte Arbeit von Yeh [8], in der das Prinzip des Metallstreifen-Polarisators mit der EMT erklärt wird. Auch in dieser Arbeit soll an einigen Stellen die EMT zur Modellierung von Subwellenlängen-Metallstreifengittern benutzt werden (Abschnitte 4.2 und 5.3). Dabei wird sich aber zeigen, daß der Aussagewert der so gewonnenen Ergebnisse sehr begrenzt ist und in jedem Falle eine Überprüfung mittels rigoroser Berechnung nötig ist.

Die wesentliche Ursache hierfür ist, daß die realisierbaren Perioden  $d$  die Bedingung  $d \ll \lambda$  nicht erfüllen. Mit der im Rahmen der vorliegenden Arbeit verfügbaren Technologie konnten bisher minimale Gitterperioden um 100 nm (im Resist) realisiert werden; die Übertragung in Metallschichten zur Herstellung von Metallstreifengittern gelang bis etwa  $d_{\min} \approx 160$  nm. Für den sichtbaren Spektralbereich ergibt sich damit je nach Wellenlänge

$$\mathcal{N}_{\min} \approx 0.25 \dots 0.15 \tag{16}$$

als minimal erreichbare normierte Gitterperiode. In [10] wird gezeigt, daß die EMT in Einzelfällen bereits für  $\mathcal{N} \leq 0.2$  richtige Ergebnisse (d.h. Fehler in den berechneten Effizienzen kleiner 0.5%) liefert, die Grenze in den meisten Fällen aber bei  $\mathcal{N} \leq 0.025$  liegt. Für größere Werte muß die Gültigkeit der EMT durch Vergleich mit rigoros berechneten Resultaten nachgeprüft werden. Für die hier betrachteten Gitter ist also die Benutzung eines rigorosen Berechnungsverfahrens unumgänglich.

Hierzu wurde die Fourier-Entwicklungs-Methode gewählt. Diese Methode ist sowohl auf rein dielektrische Gitter anwendbar als auch auf Gitter, in denen Metalle endlicher Leitfähigkeit vorkommen. Damit ist sie für die hier betrachteten Gitter sehr gut geeignet. Insbesondere die genaue Berücksichtigung der wellenlängenabhängigen Brechzahl (bzw. Leitfähigkeit) erweist sich als sehr wichtig (vgl. Abschnitte 5.4.4 und 5.4.5).

Sowohl die EMT als auch die Fourier-Entwicklungs-Methode sollen in den folgenden Abschnitten in der hier benutzten Form erläutert werden.

## 4.2 Gittermodellierung mit der Effektiven-Medium-Theorie (EMT)

### 4.2.1 Vollständige EMT

In der Effektiven-Medium-Theorie wird das (eigentlich aus mindestens zwei verschiedenen Materialien bestehende) Gitter als homogene Schicht mit einer effektiven Brechzahl  $\bar{n}$  beschrieben. Zur Bestimmung von  $\bar{n}$  gibt es viele verschiedene Ansätze, die immer getrennt für TE- und TM-Polarisation des einfallenden Lichtes erfolgen, die Brechzahlen der verschiedenen Materialien im Gitter und die geometrischen und optischen Parameter aber in unterschiedlicher Form berücksichtigen.

Für den Fall eines binären Gitters, welches aus zwei unterschiedlichen Materialien  $n_1$  und  $n_2$  besteht, ergeben sich aus einfachen Überlegungen [8] die Gleichungen

$$\begin{aligned}\bar{n}_{\text{TE}} &= [fn_1^2 + (1-f)n_2^2]^{\frac{1}{2}}, \\ \bar{n}_{\text{TM}} &= \left[ \frac{f}{n_1^2} + \frac{(1-f)}{n_2^2} \right]^{-\frac{1}{2}},\end{aligned}\tag{17}$$

wobei  $f$  das Tastverhältnis gemäß der anfangs gegebenen Definition ist ( $0 < f < 1$ ). In diesen Gleichungen werden die effektiven Brechzahlen außer von den Materialparametern  $n_1$  und  $n_2$  nur noch vom Füllfaktor  $f$  beeinflusst. Periode, Dicke und Form des realen Gitters bleiben unberücksichtigt, so daß die Gleichungen 17 eine starke Abstraktion bzw. Näherung darstellen.

Eine verbesserte Beschreibung des Gitters kann durch Berücksichtigung der normierten Gitterperiode  $\mathcal{N} = d/\lambda$  [69] und der normierten Gitterdicke  $h/\lambda$  [70] erfolgen. Dies wird als EMT höherer Ordnung bezeichnet, da  $\bar{\epsilon} = \bar{n}^2$  hierbei als Potenzreihe von  $d/\lambda$  bzw.  $h/\lambda$  beschrieben wird und die Reihenentwicklung nach einer gewissen Zahl von Gliedern abgebrochen wird. Bei Abbruch nach dem nullten Glied ergeben sich die o.g. Formeln, so daß man in diesem Falle von EMT nullter Ordnung spricht. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit soll die EMT höherer Ordnung nicht betrachtet werden, da zur exakten Modellierung von Subwellenlängengittern die Fourier-Entwicklungs-Methode benutzt wird (s. Abschnitt 4.3).

Demgegenüber ist die Anwendung der Formeln 17 auf Subwellenlängen-Metallstreifengitter naheliegend, da sie eine *sehr* einfache Beschreibung des unterschiedlichen Verhaltens in TE und

TM ermöglicht [8]. Setzt man als Material 1 im Gitterbereich ein Dielektrikum (z.B. Luft  $n_1 = 1$ ) und als Material 2 ein Metall mit komplexem Brechungsindex  $\hat{n}_2 = v + i\kappa$ , so lassen sich sofort die effektiven Brechzahlen für TE und TM aus den Gleichungen 17 berechnen. Damit kann das System Substrat–Gitter–Luft als ein System zweier aufeinanderfolgender Grenzflächen A (zwischen Substrat mit  $n_s$  und Gitterbereich mit  $\bar{n}$ ) und B (zwischen Gitterbereich mit  $\bar{n}$  und Luft mit  $n = 1$ ) betrachtet werden, deren Abstand gerade der Dicke  $h$  des Gitterbereiches entspricht. Für senkrechten Lichteinfall von der Substratseite her lauten dann die Fresnel-Koeffizienten der einzelnen Grenzflächen [71]

$$\begin{aligned} r_A &= \frac{n_s - \bar{n}}{n_s + \bar{n}}, & r_B &= \frac{\bar{n} - 1}{\bar{n} + 1}, \\ t_A &= \frac{2n_s}{n_s + \bar{n}}, & t_B &= \frac{2\bar{n}}{\bar{n} + 1}. \end{aligned} \quad (18)$$

Hieraus ergeben sich die Fresnelkoeffizienten des gesamten Schichtsystems [71] zu

$$r = \frac{r_A + r_B e^{2i\beta}}{1 + r_A r_B e^{2i\beta}}, \quad t = \frac{t_A + t_B e^{i\beta}}{1 + r_A r_B e^{2i\beta}} \quad (19)$$

mit

$$\beta = 2\pi \frac{\bar{n}h}{\lambda}, \quad (20)$$

und damit die Reflektions- bzw. Transmissionskoeffizienten zu

$$\begin{aligned} R &= |r^2|, \\ T &= (1/n_s)|t^2|. \end{aligned} \quad (21)$$

Damit lassen sich — jeweils getrennt für TE und TM — die Reflexion und Transmission des Gitters bestimmen. Im Abschnitt 5.3 werden einige Ergebnisse für Subwellenlängen-Metallstreifengitter präsentiert, die mit dem bisher beschriebenen Formalismus berechnet wurden. Dieses Vorgehen soll im folgenden als *vollständige EMT* bezeichnet werden, da beide Materialien bei der Berechnung der effektiven Brechzahlen sowohl für TE als auch für TM berücksichtigt werden. Es entspricht genau der Vorgehensweise nach Yeh [8].

#### 4.2.2 Vereinfachte EMT

Bei der Diskussion der allgemeinen Eigenschaften von Metallstreifen-Polarisatoren wird oft eine weitere Vereinfachung vorgenommen. Die meisten Metalle besitzen für Wellenlängen  $\lambda$  von einigen  $\mu\text{m}$  oder größer eine gute oder sehr gute Leitfähigkeit, so daß der Imaginärteil der komplexen Dielektrizitätskonstante  $\hat{\epsilon} = \hat{n}^2$  sehr groß wird. Für das betrachtete Gitter aus den zwei Materialien Luft ( $n_1 = 1$ ) und Metall ( $n_2 = v + i\kappa$ ) bedeutet dies, daß  $|n_1^2| \ll |n_2^2|$  und  $|\frac{1}{n_1^2}| \gg |\frac{1}{n_2^2}|$  ist. Damit folgt aus den Gleichungen 17 in guter Näherung

$$\begin{aligned}\bar{n}_{\text{TE}} &= n_2 \sqrt{1-f}, \\ \bar{n}_{\text{TM}} &= n_1 \sqrt{1/f}.\end{aligned}\tag{22}$$

Wenn diese effektiven Brechzahlen in die Formeln 18 bis 21 eingesetzt werden, können Reflexion und Transmission quantitativ bestimmt werden. Bereits aus den Gleichungen 22 ist aber ablesbar, daß  $\bar{n}_{\text{TM}}$  völlig reell ist, während  $\bar{n}_{\text{TE}}$  durch die Brechzahl des Metalls bestimmt wird. Dies bedeutet, daß sich das Gitter für TM-Polarisation wie eine dielektrische Schicht verhält, bei der für nahezu senkrechten Lichteinfall der größte Teil des Lichtes transmittiert und ein kleiner Teil reflektiert wird. In TE-Polarisation wirkt das Licht dagegen wie eine hochleitfähige metallische Schicht, die bei entsprechender Dicke das Licht vollständig reflektiert [8].

Dieses Verhalten entspricht dem des klassischen Metallstreifen-Polarisators, wie es z.B. in [3] (Kapitel 8.3.1) beschrieben wird und bereits im Abschnitt 2.1.1 kurz genannt wurde. Es läßt sich in den Formeln

$$\begin{aligned}\eta_{\text{TE}} &\approx 0, \\ \eta_{\text{TM}} &\approx 1\end{aligned}\tag{23}$$

zusammenfassen, wobei dieses Verhalten für Tastverhältnisse  $f$  vorliegt, die nicht zu nahe an 0 oder 1 liegen. Lediglich für  $f \rightarrow 0$  wird  $\eta_{\text{TM}} \rightarrow 0$  und für  $f \rightarrow 1$  wird  $\eta_{\text{TE}} \rightarrow 1$ . Die o.g. Voraussetzungen für dieses Verhalten lauten:

$$d \ll \lambda,\tag{24}$$

$$\Im\{\hat{n}_{\text{Metall}}\} = \kappa \gg 1.\tag{25}$$

Die Bedingung entsprechend Gleichung 24 (gleichbedeutend mit  $\mathcal{N} \ll 1$ ) wird dabei oft als quasistatisches Limit bezeichnet.

Die Voraussetzungen zur Anwendung der Gleichungen 22 sind (wie bereits erwähnt) für die hier untersuchten Gitter nicht mehr gegeben. Zum Zweck des Vergleichs wird dieses Vorgehen in Abschnitt 5.3 aber dennoch benutzt. Es soll dabei (zur Unterscheidung von der vollständigen EMT) als *vereinfachte EMT* bezeichnet werden, da bei der Berechnung der effektiven Brechzahlen jeweils eine Brechzahl komplett vernachlässigt wird.

## 4.3 Die Fourier-Entwicklungs-Methode

### 4.3.1 Vorbemerkungen

Die Benutzung der Fourier-Entwicklungs-Methode als rigoreses Verfahren zur Analyse des Verhaltens von Metallstreifengittern und zum Vergleich mit experimentellen Resultaten ist einer der Kernpunkte der vorliegenden Arbeit. Diese Methode soll daher in den folgenden Abschnitten 4.3.2 bis 4.3.4 erläutert werden, allerdings nur in ihren wesentlichen Schritten. Dabei soll

neben der allgemeinen Vorgehensweise insbesondere deutlich werden, inwieweit diese Methode *tatsächlich* eine strenge Lösung der Maxwell-Gleichungen ist, bzw. welche Näherungen und Beschränkungen im Verlauf der analytischen sowie numerischen Behandlung erfolgen.

Eine wesentlich detailliertere Darstellung dieser Methode (einschließlich Details zu Fragen der Implementierung, der Speicheranforderungen und der Rechenzeit) findet sich in [72]. Die hier folgende knappe Beschreibung folgt weitgehend der dortigen Darstellung; lediglich bei der Lösung des TM-Falles ergibt sich eine wesentliche Modifizierung (s. Abschnitt 4.3.4).

Neben der Fourier-Entwicklungs-Methode gibt es eine Fülle anderer, mehr oder weniger unterschiedlicher rigoroser Berechnungsverfahren zur Lösung der Maxwell-Gleichungen, wie z.B. die „Rigorous Coupled Wave Analysis“ (RCWA) [73, 74], die Koordinaten-Transformations-Methode (Chandezon-Methode) [75, 76] oder die Integral-Gleichungs-Methode [77], um nur einige zu nennen. All diese Methoden unterscheiden sich in ihrem Lösungsansatz, in der Art der benutzten numerischen Verfahren, in ihrer Anwendbarkeit auf spezifische (z.B. ideal binäre oder sinusförmige) Gitterprofile oder ideal bzw. endlich leitfähige Materialien usw. Übersichtsdarstellungen der verschiedenen Verfahren und ihrer Vor- und Nachteile finden sich in [67] und [78], detailliertere Beschreibungen der verschiedenen Methoden z.B. in [79]–[81].

### 4.3.2 Grundlagen

Die Fourier-Entwicklungs-Methode soll in der vorliegenden Arbeit zur Lösung des in Abb. 8 gezeigten Problems benutzt werden: Eine ebene Welle fällt in der  $x$ - $z$ -Ebene von der Substratseite her unter einem Winkel  $\theta$  auf ein (in  $y$ -Richtung invariantes) binäres Gitter. Es entstehen reflektierte Beugungsordnungen auf der Substrat-Seite sowie transmittierte Beugungsordnungen auf der Superstrat-Seite, deren Effizienzen zu bestimmen sind. Der Gitterbereich zwischen  $z = 0$  und  $z = h$  enthält mehrere Gebiete unterschiedlicher Brechzahl, die sich in  $x$ -Richtung periodisch mit der Gitterperiode  $d$  wiederholen.

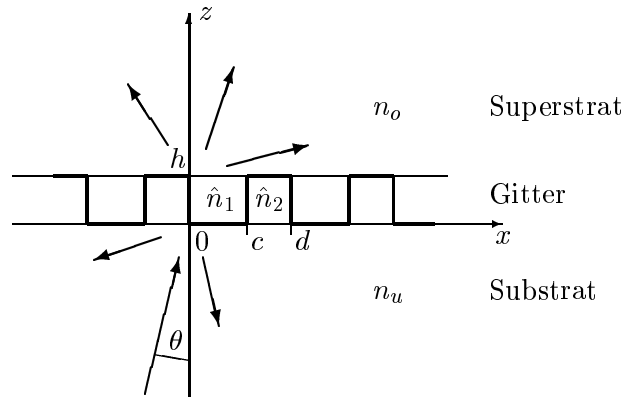


Abbildung 8: Schematische Übersicht der Geometrie bei der rigorosen Berechnung binärer Gitter

Bei der Behandlung dieser Problemstellung wird (ausgehend von den Maxwell-Gleichungen) angenommen, daß

- alle Feldgrößen einen zeitharmonischen Anteil besitzen:  $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) \cdot \exp\{-i\omega t\}$  (analog für  $\vec{D}$ ,  $\vec{H}$ ,  $\vec{B}$  und  $\vec{j}$ ), wobei  $\omega$  eine konstante Frequenz ist entsprechend einer stationären, monochromatischen Beleuchtung;
- keine magnetischen Materialien vorliegen ( $\mu = \mu_0$ ) sowie keine freien elektrischen Ladungen vorhanden sind ( $\rho_{\text{ext}} = 0$ );
- aufgrund der Invarianz des Problems in  $y$ -Richtung alle vektoriellen Größen nur noch von  $x$  und  $z$  abhängig sind (z.B.  $\vec{E}(\vec{r}) \rightarrow \vec{E}(x, z)$ ) und somit in den Maxwell-Gleichungen alle partiellen Ableitungen nach  $y$  verschwinden;
- für alle Feldgrößen die Komponenten-Darstellung verwendet wird, z.B.  $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$ .

Unter diesen Voraussetzungen lassen sich aus den Maxwell-Gleichungen zwei voneinander unabhängige Wellengleichungen für  $E_y(x, z)$  und  $H_y(x, z)$  ableiten. Die Wellengleichung für  $E_y(x, z)$  lautet

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} E_y(x, z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} E_y(x, z) + k^2 \hat{\epsilon}_r(x, z) E_y(x, z) = 0 \quad (26)$$

mit

$$\begin{aligned} k &= \omega/c, \\ c &= (\epsilon_0 \mu_0)^{-1/2}, \\ \hat{\epsilon}_r(x, z) &= \frac{1}{\epsilon_0} \left( \epsilon(x, z) - i \frac{\sigma(x, z)}{\omega} \right). \end{aligned}$$

Hier ist  $\hat{\epsilon}_r(x, z)$  die komplexe relative Dielektrizitätskonstante, aus der sich der komplexe Brechungsindex

$$\hat{n}(x, z) = \sqrt{\hat{\epsilon}_r(x, z)} \quad (27)$$

ergibt. Dabei wird die Eindeutigkeit durch die Konvention  $\Re\{\hat{n}(x, z)\} + \Im\{\hat{n}(x, z)\} \geq 0$  erreicht. Für  $H_y(x, z)$  resultiert analog die Wellengleichung

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\hat{\epsilon}_r(x, z)} \frac{\partial}{\partial x} H_y(x, z) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\hat{\epsilon}_r(x, z)} \frac{\partial}{\partial z} H_y(x, z) \right] + k^2 H_y(x, z) = 0 \quad (28)$$

Wenn durch Lösung dieser Gleichungen  $E_y(x, z)$  und  $H_y(x, z)$  bekannt sind, lassen sich daraus alle anderen Feldkomponenten bestimmen, so daß das elektromagnetische Feld durch diese beiden Größen vollständig bestimmt ist. Da  $E_y(x, z)$  und  $H_y(x, z)$  völlig unabhängig voneinander sind, bezeichnet man den von  $E_y(x, z)$  bestimmten Anteil als TE-Polarisation und den von  $H_y(x, z)$  bestimmten Anteil als TM-Polarisation.

Neben den Wellengleichungen ergeben sich aus den Maxwell-Gleichungen auch noch Übergangsbedingungen an den Grenzen von Bereichen unterschiedlicher Brechzahl. Die für die vorliegende Rechnung relevanten Übergangsbedingungen lauten (bezogen auf den Übergang zwischen zwei Bereichen 1 und 2)

$$\vec{n}_{12} \times (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) = 0, \quad (29)$$

$$\vec{n}_{12} \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) = \vec{j}_s = 0. \quad (30)$$

Dabei ist  $\vec{n}_{12}$  der Normalenvektor auf der Grenzfläche zwischen den Bereichen 1 und 2. Für die hier relevanten, nicht unendlich gut leitende Materialien existieren keine Oberflächenströme (d.h.  $\vec{j}_s = 0$ ), was bereits in Gleichung 30 berücksichtigt wurde.

### 4.3.3 Berechnung für TE-Polarisation

Zu bestimmen ist nun eine Lösung der Gleichung 26 für die in Abb. 8 gezeigte Geometrie, d.h. eine Darstellung von  $E_y(x, z)$  im Substrat, im Superstrat und im Gitterbereich. Im Substrat setzt sich diese Größe aus der einfallenden Welle  $E_y^i$  und den reflektierten Beugungsordnungen  $E_y^r$  zusammen:

$$E_y(x, z) = E_y^i(x, z) + E_y^r(x, z). \quad (31)$$

Die einfallende ebene Welle hat die Form

$$E_y^i(x, z) = \exp\{ikn_u(x \sin \theta + z \cos \theta)\}, \quad (32)$$

wobei die Amplitude auf 1 normiert worden ist. Für das gebeugte Feld in Reflexion läßt sich eine sehr anschauliche Darstellung ableiten, die als Rayleigh-Entwicklung bekannt ist. Es gilt

$$E_y^r(x, z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} R_m \exp\{i(\alpha_m x - r_m z)\} \quad (33)$$

mit

$$\alpha_m = kn_u \sin \theta + 2\pi m/d, \quad (34)$$

$$r_m = \begin{cases} [(kn_u)^2 - \alpha_m^2]^{1/2} & \text{falls } |\alpha_m| \leq kn_u \\ i[\alpha_m^2 - (kn_u)^2]^{1/2} & \text{falls } |\alpha_m| > kn_u \end{cases}. \quad (35)$$

Dabei bezeichnet  $m$  den Index der Beugungsordnung. Alle Beugungsordnungen mit reellen  $r_m$  propagieren, Beugungsordnungen mit imaginären  $r_m$  sind evaneszente Ordnungen.

Im Superstrat besteht das Feld  $E_y$  nur aus den transmittierten Beugungsordnungen, die sich ebenfalls in einer Rayleigh-Entwicklung darstellen lassen:

$$E_y(x, z) = E_y^t(x, z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} T_m \exp\{i[\alpha_m x + t_m(z - h)]\}, \quad (36)$$

wobei  $t_m$  analog zu Gleichung 35 berechnet wird, nur daß dabei  $n_u$  durch  $n_o$  ersetzt werden muß. Da  $r_m$ ,  $t_m$  und  $\alpha_m$  leicht berechnet werden können, ist das elektromagnetische Feld durch die Gleichungen 33 und 36 im Substrat und Superstrat bestimmt bis auf die noch unbekannten Amplituden  $R_m$  und  $T_m$ .

Zur Berechnung des Feldes im Gitterbereich  $0 < z < h$  wird zunächst ein Separationsansatz  $E_y(x, z) = X(x)Z(z)$  gewählt und in Gleichung 26 eingesetzt. Für die  $z$ -Komponente ergibt sich dann die Differentialgleichung

$$\frac{d^2}{dz^2}Z(z) + \gamma^2 Z(z) = 0, \quad (37)$$

wobei  $\gamma$  die Separationskonstante ist. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist

$$Z(z) = a \exp\{i\gamma z\} + b \exp\{-i\gamma(z - h)\}, \quad (38)$$

wobei  $a$  und  $b$  zunächst unbestimmte Konstanten sind. Für die  $x$ -Komponente ergibt sich die Differentialgleichung

$$\frac{d^2}{dx^2}X(x) + [k^2 \hat{\epsilon}_r(x) - \gamma^2]X(x) = 0. \quad (39)$$

Der Übergang  $\hat{\epsilon}_r(x, z) \rightarrow \hat{\epsilon}_r(x)$  erfolgt dabei unter der Annahme, daß entsprechend Abb. 8 in der modulierten Gitterregion  $0 < z < h$  Bereiche mit unterschiedlichem komplexen Brechungsindex nur in  $x$ -Richtung aufeinanderfolgen, so daß es keinerlei Abhängigkeit in  $z$ -Richtung mehr gibt. Zur Lösung der Gleichung 39 wird die in  $x$ -Richtung periodische Funktion  $\hat{\epsilon}_r(x)$  durch eine Fourierreihe

$$\hat{\epsilon}_r(x) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \epsilon_p \exp\left\{i2\pi \frac{px}{d}\right\} \quad (40)$$

dargestellt und für die gesuchte Funktion  $X(x)$  der ebenfalls auf der Fourierreihen-Darstellung beruhender Ansatz

$$X(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} P_m \exp\{i\alpha_m x\} \quad (41)$$

benutzt. Diese beiden Darstellungen werden in Gleichung 39 eingesetzt. Die weitere Rechnung führt unter Ausnutzung der Orthogonalität des Funktionensystems  $\exp\{i\alpha_m x\}$  bei Integration über das Intervall  $(0, d)$  auf ein Gleichungssystem. In diesem Schritt zeigt sich die Zweckmäßigkeit der Fourierreihen-Darstellung der Funktionen  $\hat{\epsilon}_r(x)$  und  $X(x)$ , denn durch das Ausnutzen der Orthogonalität ergibt sich eine wesentliche Vereinfachung dieses Gleichungssystems. Es kann dann in der Form eines Eigenwertproblems

$$\mathbf{M}\vec{P} = \gamma^2 \vec{P} \quad (42)$$



dargestellt werden, wobei  $\mathbf{M}$  eine Matrix mit den Elementen  $M_{lm} = k^2 \epsilon_{l-m} - \alpha_m^2 \delta_{lm}$  ist, der Vektor  $\vec{P}$  die Komponenten  $P_l$  aus dem Ansatz nach Gleichung 41 enthält und der Eigenwert dem Quadrat der Separationskonstante  $\gamma$  entspricht. Die Lösung eines solchen Eigenwertproblems kann mit numerischen Standardverfahren erfolgen und führt auf eine abzählbare Menge von Eigenwerten  $\gamma_n^2$  und zugehörigen Eigenvektoren  $\vec{P}_n$  mit den Elementen  $P_{ln}$ . Sind diese Größen berechnet, ergibt sich zusammen mit Gleichung 38 die Darstellung des Feldes in der Gitterregion  $0 \leq z \leq h$  zu:

$$E_y(x, z) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} P_{ln} \exp\{i\alpha_m x\} [a_n \exp\{i\gamma_n z\} + b_n \exp\{i\gamma_n(z-h)\}] , \quad (43)$$

wobei für die Eigenwerte die Konvention  $\Re\{\gamma_n\} + \Im\{\gamma_n\} \geq 0$  gilt. Damit liegt nun auch eine Darstellung des elektrischen Feldes  $E_y(x, z)$  im Gitterbereich vor, wobei die Koeffizienten  $a_n$  und  $b_n$  noch unbekannt sind.

Die Gleichungen 32 und 33 sowie 43 und 36 beschreiben das Feld jeweils in einem der Gebiete Substrat, Gitterbereich und Superstrat. Jedoch sind diese Gleichungen nicht unabhängig voneinander, weil das elektrische Feld an den Grenzflächen zwischen den verschiedenen Gebieten den Übergangsbedingungen genügen muß. Somit müssen die Gleichungen 29 und 30 noch berücksichtigt werden. Aus Gleichung 29 folgt der stetige Übergang von  $E_y(x, z)$  an den Grenzflächen bei  $z = 0$  und bei  $z = h$ . Das Einsetzen der Darstellungen für  $E_y(x, z)$  in den verschiedenen Bereichen führt dann auf die Gleichungen

$$\delta_{l0} + R_l = \sum_{m=1}^{\infty} (a_m + b_m \exp\{i\gamma_m h\}) P_{lm} , \quad (44)$$

$$T_l = \sum_{m=1}^{\infty} (a_m \exp\{i\gamma_m h\} + b_m) P_{lm} . \quad (45)$$

Analog ergibt sich aus der Übergangsbedingung für  $\vec{H}$  nach Gleichung 30 der stetige Übergang von  $H_x(x, z)$  an den Grenzflächen bei  $z = 0$  und bei  $z = h$ , was gleichbedeutend mit dem stetigen Übergang von  $\frac{\partial}{\partial z} E_y(x, z)$  ist. Daraus erhält man die Gleichungen

$$r_l(\delta_{l0} + R_l) = \sum_{m=1}^{\infty} \gamma_m (a_m - b_m \exp\{i\gamma_m h\}) P_{lm} , \quad (46)$$

$$t_l T_l = \sum_{m=1}^{\infty} \gamma_m (a_m \exp\{i\gamma_m h\} - b_m) P_{lm} . \quad (47)$$

Hieraus lassen sich zunächst die noch fehlenden Koeffizienten  $a_n$  und  $b_n$  aus Gleichung 43 bestimmen. Durch Einsetzen dieser Koeffizienten erhält man auch die noch fehlenden Amplituden  $R_m$  und  $T_m$  aus Gleichung 33 bzw. 36, so daß keinerlei unbekannte Koeffizienten mehr existieren.

Somit ist das elektromagnetische Feld vollständig bekannt. Die im vorliegenden Fall interessierenden Effizienzen der einzelnen Beugungsordnungen ergeben sich im Rahmen der Maxwell'schen Theorie aus dem zeitlichen Mittel der  $z$ -Komponenten des Poynting-Vektors  $\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$ .

Damit resultiert für die vorliegende Problemstellung

$$\eta_m^R = \Re\{r_m/r_0\}|R_m|^2, \quad (48)$$

$$\eta_m^T = \Re\{t_m/r_0\}|T_m|^2, \quad (49)$$

wobei  $\eta^R$  bzw.  $\eta^T$  die Effizienz in Reflexion bzw. Transmission bezeichnet und  $m$  der Nummer der jeweiligen Beugungsordnung entspricht. Mit diesen Gleichungen ist ein direkter Vergleich zwischen rigoros berechneten und experimentell gemessenen Ergebnissen möglich.

#### 4.3.4 Berechnung für TM-Polarisation

Die Behandlung des TM-Falles (Lösung von Gleichung 28) erfolgt weitgehend analog. Unterschiede ergeben sich einerseits, weil Gleichung 28 eine etwas andere Struktur als Gleichung 26 aufweist, so daß sich einige Lösungsansätze bzw. Ableitungen verändern. Andererseits gibt es neben diesen mathematischen Unterschieden auch Unterschiede im physikalischen Verhalten der zugrundeliegenden Feldgrößen, die bei der Anwendung der mathematischen Lösungsverfahren berücksichtigt werden müssen.

Die Darstellung des Feldes  $H_y(x, z)$  erfolgt wiederum getrennt für Substrat, Superstrat und Gitterbereich; im Gitterbereich  $0 < z < h$  wird erneut ein Separationsansatz  $H_y(x, z) = X(x)Z(z)$  vorgenommen. Wegen der speziellen Struktur der Gleichung 28 ist es nun nützlich, neben der Funktion  $H_y(x, z)$  auch die Funktion

$$Q(x, z) = \frac{1}{\hat{\epsilon}_r(x)} \frac{\partial}{\partial z} H_y(x, z) \quad (50)$$

zu betrachten. Unter Berücksichtigung der Gleichungen 38 und 41 kann diese Funktion dann durch

$$Q(x, z) = i\gamma Z(z) \sum_{m=-\infty}^{\infty} Q_m \exp\{i\alpha_m x\} \quad (51)$$

dargestellt werden. Die Fourierkoeffizienten  $P_m$  (aus Gleichung 41) und  $Q_m$  sind dabei über

$$\mathbf{N}\vec{Q} = \vec{P} \quad (52)$$

miteinander verknüpft. Durch geeignetes Kombinieren dieser Gleichungen erhält man (analog zum TE-Fall) ein Eigenwert-Problem

$$\mathbf{M}\mathbf{N}\vec{Q} = \gamma^2 \vec{Q}, \quad (53)$$

wobei die Matrizen  $\mathbf{M}$  und  $\mathbf{N}$  aus den Elementen

$$M_{lm} = k^2 \delta_{lm} - \alpha_l \xi_{l-m} \alpha_m, \quad (54)$$

$$N_{lm} = \epsilon_{l-m} \quad (55)$$

bestehen. Die Koeffizienten  $\xi_p$  sind dabei die Fourierkoeffizienten der Funktion

$$\frac{1}{\hat{\epsilon}_r(x)} = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \xi_p \exp \left\{ i 2\pi \frac{px}{d} \right\}. \quad (56)$$

Durch numerische Lösung des Eigenwertproblems nach Gleichung 53 erhält man die Eigenwerte  $\gamma_n$  und die Eigenvektoren  $\vec{Q}_n$ , und damit nach Gleichung 52 auch die Eigenvektoren  $\vec{P}_n$ . Damit ist — analog zum TE-Fall — das Feld  $H_y(x, z)$  im Gitterbereich bis auf fehlende Koeffizienten  $a_n$ ,  $b_n$ ,  $R_m$  und  $T_m$  bestimmt.

Bei der bisherigen Behandlung des TM-Falles wurden die Fourierreihen-Entwicklungen der verschiedenen Größen völlig analog zum TE-Fall benutzt. In einigen Fällen ist dies aber mathematisch falsch [82]. Die Ursache hierfür liegt im Konvergenzverhalten von Produkten aus Fourierreihen an Unstetigkeitsstellen der in eine Fourierreihe entwickelten Größen. Wie von Li detailliert nachgewiesen wurde [83, 84], kann beim Übergang zur Fourierreihen-Darstellung das Produkt zweier stückweise glatten Funktionen an einer Stelle  $x$  nicht einfach durch das Cauchy-Produkt ihrer Fourier-Koeffizienten ersetzt werden, wenn beide Funktionen an dieser Stelle  $x$  einen Sprung haben, das Produkt beider Funktionen aber an dieser Stelle stetig ist.

Im vorliegenden Fall ist dies für Gleichung 52 relevant. Auf der rechten Seite dieser Gleichung steht der Vektor  $\vec{P}$ , d.h. die Fourier-Koeffizienten der Funktion  $X(x)$ , d.h. des  $x$ -abhängigen Anteils von  $H_y(x, z)$ . Aus Gleichung 30 folgt, daß  $X(x)$  stetig ist beim Übergang zwischen Bereichen unterschiedlicher Brechzahl in  $x$ -Richtung innerhalb der Gitterregion  $0 < z < h$ . Auf der linken Seite der Gleichung steht das Cauchy-Produkt der Fourierkoeffizienten der dielektrischen Funktion  $\hat{\epsilon}_r(x)$  und der Fourierkoeffizienten der Funktion  $Q(x, z)$ . Da  $\hat{\epsilon}_r(x)$  an der Grenze von Bereichen unterschiedlicher Brechzahl natürlich eine Unstetigkeit hat,  $H_y(x, z)$  an dieser Grenze aber stetig ist, ist die Funktion  $Q(x, z)$  an dieser Stelle  $x$  unstetig. Auf der linken Seite steht somit das Cauchy-Produkt der Fourierkoeffizienten zweier unstetiger Funktionen. Damit ist in dieser Gleichung genau der oben beschriebene Fall gegeben, und die Benutzung der Fourierreihen-Darstellung in der beschriebenen Form kann zu falschen Ergebnissen führen. Um dies zu verhindern, muß die Gleichung 52 neu formuliert werden:

$$\mathbf{N}^{-1} \vec{Q} = \vec{P} \quad (57)$$

mit

$$N_{lm} = \xi_{l-m}. \quad (58)$$

Dabei bezeichnet  $\mathbf{N}^{-1}$  die invertierte Matrix zu  $\mathbf{N}$ . Die Verwendung der Gleichung 57 ist nunmehr mathematisch richtig [83]. Durch diese Änderung erhält man aber auch eine neue Eigenwertgleichung [67]

$$\mathbf{N}^{-1} (k^2 \mathbf{I} - \mathbf{K} \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K}) \vec{P} = \gamma^2 \vec{P} \quad (59)$$

mit

$$K_{lm} = \delta_{lm} \alpha_l, \quad (60)$$

$$E_{lm} = \epsilon_{l-m}, \quad (61)$$

$$I_{lm} = \delta_{lm}. \quad (62)$$

Die Berücksichtigung dieser Änderungen führt dann auf eine mathematisch korrekte und damit numerisch sehr stabile Form des Lösungsverfahrens im TM-Fall [67].

Nachdem die  $\gamma_n$ ,  $P_{ln}$  und  $Q_{ln}$  bestimmt sind, können die noch fehlenden Koeffizienten  $a_n$ ,  $b_n$ ,  $R_m$  und  $T_m$  aus den Übergangsbedingungen für  $H_y(x, z)$  und  $Q(x, z)$  an den Grenzflächen bei  $z = 0$  und  $z = h$  bestimmt werden; die Vorgehensweise ist dabei analog zum TE-Fall. Damit lassen sich dann auch für den TM-Fall die Beugungseffizienzen des der Berechnung zugrundeliegenden Gitters bestimmen, und es folgt

$$\eta_m^R = \Re \left\{ \frac{r_m}{r_0} \right\} |R_m|^2, \quad (63)$$

$$\eta_m^T = \Re \left\{ \frac{(n_u)^2 t_m}{(n_o)^2 r_0} \right\} |T_m|^2. \quad (64)$$

#### 4.3.5 Numerische Durchführung

Das in den beiden vorangehenden Abschnitten beschriebene Berechnungsverfahren wurde als Gruppe von MATLAB-Programmen und -Unterprogrammen implementiert. Dabei ist von Vorteil, daß Vektoren und Matrizen in MATLAB als Standard-Variablentyp zur Verfügung stehen. Ferner verfügt MATLAB über effiziente numerische Routinen zur Lösung von linearen Gleichungssystemen und Eigenwertproblemen, die für das vorliegende Berechnungsverfahren benutzt wurden.

Bei der praktischen Berechnung sind alle unendlichen Reihenentwicklungen und unendlich-dimensionale Matrizen bzw. Vektoren auf eine endliche Ordnung zu reduzieren. Im allgemeinen müssen mindestens alle propagierenden Rayleigh-Ordnungen und genügend evaneszente Ordnungen betrachtet werden. Als Kriterium für die Genauigkeit wird üblicherweise die Konvergenz der berechneten Effizienzen  $\eta_m^T$  und  $\eta_m^R$  bei Vergrößerung der Zahl der in der Rechnung berücksichtigten Ordnungen angenommen [72]. Genauere Untersuchungen hierzu enthalten z.B. [85, 86]. Darüber hinaus können die berechneten Ergebnisse auch durch Vergleich mit anderen rigorosen Verfahren überprüft werden, die auf anderen Lösungsansätzen bzw. numerischen Algorithmen beruhen. Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit berechneten Resultate wurden teilweise mit der Integralmethode IESMP [77] verglichen, wobei sich eine gute Übereinstimmung ergab [87]. Generell kann auch durch solche Vergleiche nicht völlig ausgeschlossen werden, daß die theoretischen Modelle nicht hinreichend oder zu ungenau sind. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit ergaben sich dazu aber keinerlei Hinweise.

## 5 Modellierung der optischen Eigenschaften

### 5.1 Einleitung

Das optische Verhalten von Subwellenlängen-Metallstreifengittern im sichtbaren Spektralbereich soll im aktuellen Kapitel anhand von Modellrechnungen ausführlich untersucht werden. Zunächst werden hierzu Ergebnisse rigoroser Berechnungen mit solchen der EMT verglichen. Obwohl bereits in Abschnitt 4.1 erläutert wurde, daß die EMT keine vollständig korrekte Beschreibung des optischen Verhaltens liefern kann, ergibt ein solcher Vergleich interessante Aspekte, insbesondere zum inversen Polarisations-Effekt (siehe Abschnitt 5.3.2). Im zweiten Teil wird der Einfluß der einzelnen Parameter auf das optische Verhalten detailliert untersucht, wobei ausschließlich die Fourier-Entwicklungs-Methode angewendet wird.

Diese detaillierten Untersuchungen sollen einerseits einen ungefähren Überblick über das recht komplizierte Verhalten von Subwellenlängen-Metallstreifengittern im sichtbaren Spektralbereich ermöglichen. Zum anderen gestatten sie eine gute Einordnung der im Kapitel 6 gezeigten experimentellen Resultate. Diese können aufgrund vielfältiger Beschränkungen (Grenzen der Herstellungstechnologie, Arbeitsaufwand, Kosten) immer nur für einen limitierten Bereich der vielfältig variierbaren Gitterparameter durchgeführt werden. Mit Modellrechnungen können diese Untersuchungen sinnvoll ergänzt werden, weil dadurch mit geringerem Aufwand eine größere Zahl von Ergebnissen, also ein besserer Überblick erzielt werden kann. Umgekehrt bedarf die Modellierung der Ergänzung durch experimentelle Resultate, um zu prüfen, inwieweit die benutzten Modelle eine adäquate Widerspiegelung der Realität darstellen.

Die folgende Analyse beschränkt sich auf die Darstellung der optischen Eigenschaften im Fernfeld der Gitter. Untersuchungen über die zugrundeliegenden Effekte im Nahfeld bzw. innerhalb des Gitters (elektromagnetische Feldverteilung, Absorption, Anregung von Oberflächenplasmonen etc.) waren nicht Gegenstand dieser Arbeit. Hierzu existieren verschiedene Veröffentlichungen [88]-[90].

### 5.2 Auswahl der Parameter

Die optischen Eigenschaften der Subwellenlängen-Metallstreifengitter hängen von einer ganzen Reihe von Parametern ab. Um diese Vielfalt etwas einzugrenzen, wurden bei der bisherigen Betrachtung die Annahmen gemacht, daß

- das Material des Superstrats und der Gittergräben Luft ( $n = 1$ ) ist;
- die Gitterstege homogen aus Metall bestehen (Brechzahl des massiven Materials);
- ein ideal binäres Gitterprofil vorliegt.

Unter Beibehaltung dieser Annahmen verbleiben folgende sieben variable Parameter:

- Materialparameter (d.h. Brechzahlen) des Substrats und der Metallstreifen;
- Beleuchtungs-Parameter: Wellenlänge und Einfallswinkel des Lichtes;
- Geometrische Parameter: Periode, Grabenbreite und Profiltiefe des Gitters.

Jedoch sind diese Parameter nicht völlig unabhängig voneinander. So kann von vornherein die Grabenbreite (theoretisch) nur zwischen null und der Periode variieren. Die Brechzahlen sind auch nicht beliebig wählbar, sondern hängen von den zur Verfügung stehenden Materialien sowie von der Lichtwellenlänge ab. Eine weitere Verkomplizierung ergibt sich bei der experimentellen Arbeit, da bei der Gitterherstellung zusätzliche Beschränkungen auftreten (minimal herstellbare Periode, maximal erreichbares Aspektverhältnis). Verbunden damit ist, daß abgeleitete Größen wie das Tastverhältnis  $f$  oder das Aspektverhältnis  $\mathcal{A}$  teilweise einen besseren Überblick über die Gittereigenschaften ermöglichen als die o.g. Parameter.

Da im Sinne einer übersichtlichen Darstellung nicht alle Parameter gleichzeitig variiert werden konnten, mußten für einige Größen feste Werte vorgegeben werden. Diese sind nicht völlig willkürlich gewählt. Es wurde versucht, Parameter zu benutzen, die auch (mit der derzeit am IAP der FSU vorhandenen Technologie) experimentell realisierbar sind bzw. nahe bei diesen liegen. Dies heißt insbesondere:

- Die Profiltiefe der Gitter (also die Dicke der Metallstreifen) ist üblicherweise kleiner 100 nm, oft sogar kleiner 50 nm;
- die Gitterperiode ist meist größer als 100 nm.

Abweichende Parameter wurden in der Modellierung nur dann benutzt, wenn die Demonstration bestimmter optische Effekte dies erforderte.

Für die Brechzahlen der Metalle wurden die Werte für massive Materialien aus [91] bzw. [92] verwendet<sup>8</sup>. Die Brechzahlen für dünne Schichten und insbesondere für strukturierte Schichten können möglicherweise von diesen Werten abweichen, jedoch konnten keine konkreten Zahlenwerte hierfür ermittelt werden.

## 5.3 Vergleich von rigorosen Berechnungen und Resultaten der EMT

### 5.3.1 Normaler Polarisationsseffekt

Ein Beispiel, in dem rigorose Theorie und EMT qualitativ ähnliche Resultate liefern, ist der Fall eines Chrom-Metallstreifengitters bei  $\lambda = 633$  nm. Als Parameter wurden angenommen:  $d = 220$  nm,  $h = 40$  nm,  $n_{\text{Substrat}} = 1.5$ ,  $n_{\text{Superstrat}} = 1$  und senkrechter Lichteinfall von der Substrat-Seite. Die berechneten Transmissionen in Abhängigkeit vom Tastverhältnis zeigt Abbildung 9,

---

<sup>8</sup>Für Rechnungen bei variabler Wellenlänge wurden teilweise MATLAB-Skripte zur Spline-Interpolation der Brechzahl, basierend auf Werten aus [91] benutzt, die freundlicherweise von P. Laakonen (Univ. Joensuu, Finnland) zur Verfügung gestellt wurden.

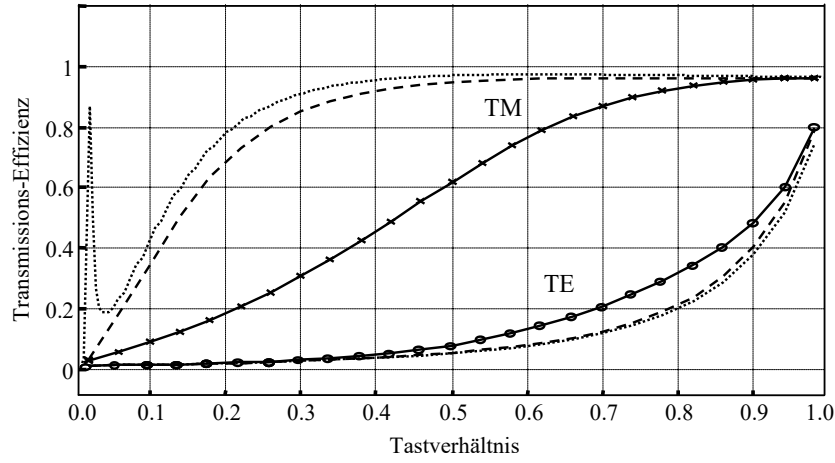


Abbildung 9: Transmission eines Chrom-Metallstreifengitters mit  $d = 220$  nm,  $h = 40$  nm bei  $\lambda = 633$  nm, berechnet mit rigoroser Theorie (durchgezogen), vollständiger EMT (gestrichelt) und vereinfachter EMT (gepunktete Linie)

und zwar für die rigorose Theorie (durchgezogen), für die vollständige EMT (gestrichelt) und für die vereinfachte EMT (gepunktete Linie).

Während die Effizienzen in TE für alle drei Modelle relativ gut übereinstimmen, zeigen sich in TM größere Unterschiede. Beide Varianten der EMT ergeben in TM höhere Transmissionen als die rigorose Theorie. Die Ursache hierfür ist die Berücksichtigung der realen Gitterperiode in der rigorosen Rechnung, während in der EMT das quasistatische Limit angenommen wird. Damit idealisiert die EMT das optische Verhalten des Gitters in Richtung einer besseren Trennung von TE- und TM-Polarisation.

Weiterhin zeigt Abbildung 9, daß sich in der vereinfachten EMT für  $f \rightarrow 0$  nicht  $\eta_{\text{TM}} \rightarrow 0$  ergibt. Dieses Verhalten folgt aus Gleichung 22. Für  $f \rightarrow 0$  geht  $\bar{n}_{\text{TM}} \rightarrow \infty$ , d.h. für eine konstante geometrische Dicke  $h$  geht die optische Dicke des Gitterbereichs gegen unendlich. Damit erhält man ein Verhalten analog dem einer planparallelen Platte bzw. eines Fabry-Perot-Interferometers, und für  $f \rightarrow 0$  werden abwechselnd Interferenzmaxima und -minima in immer dichter Folge durchlaufen. Abbildung 9 zeigt wegen der begrenzten Auflösung bezüglich  $f$  nur je ein derartiges Maximum und Minimum.

Im Modell der vollständigen EMT erreicht dagegen die TM-Effizienz für  $f = 0$  korrekterweise genau den Transmissionswert einer geschlossenen Metallschicht der entsprechenden Dicke, da bei der Berechnung von  $\bar{n}_{\text{TM}}$  für  $f \rightarrow 0$  die Brechzahl des Metalls immer stärker dominierend wird. Für Chrom ist dabei der in Abbildung 9 wiedergegebene Verlauf der TM-Transmission bei Annäherung an  $f = 0$  sehr kontinuierlich. Für andere Materialien kann es aber zu lokalen Extrema in der TM-Transmission kommen, die analog der o.g. Erklärung für die vereinfachten EMT als Interferenzerscheinungen in Schichten aufgefaßt werden können.

Beide Varianten der EMT zeigen (abgesehen von der eben besprochenen Ausnahme für sehr

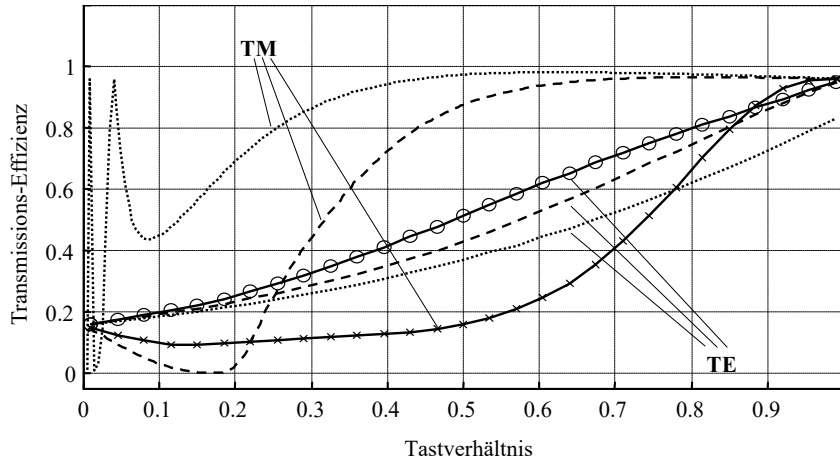


Abbildung 10: Transmission eines Silber-Metallstreifengitters mit  $d = 150 \text{ nm}$ ,  $h = 40 \text{ nm}$  bei  $\lambda = 400 \text{ nm}$ , berechnet mit rigoroser Theorie (durchgezogen), vollständiger EMT (gestrichelt) und vereinfachter EMT (gepunktete Linie)

kleine  $f$ ) qualitativ das gleiche Verhalten wie das rigorose Ergebnis: Die Transmission für TM-Polarisation ist größer als die Transmission für TE-Polarisation, das Polarisationsverhältnis  $\mathcal{P}$  ist also größer als eins. Damit ist das betrachtete Gitter ein typisches Beispiel für die Realisierung des normalen Polarisierungseffektes.

### 5.3.2 Inverser Polarisierungseffekt

Für bestimmte Kombinationen der Beleuchtungs- und Gitterparameter kann es vorkommen, daß die Transmission für TM-Polarisation kleiner ist als die Transmission für TE-Polarisation. Dieses Verhalten ist entgegengesetzt zum allgemein bekannten Verhalten des Metallstreifen-Polarisators und soll als inverser Polarisierungseffekt bezeichnet werden. Er wurde bisher in der Literatur relativ wenig beachtet; eine Erwähnung des Effekts findet sich in [7]. Detaillierte Untersuchungen zum Auftreten des inversen Effekts werden in Abschnitt 5.4.5 vorgenommen. Der inverse Effekt soll aber bereits hier gezeigt werden, da sich herausstellt, daß der inverse Effekt kein Phänomen ist, welches *ausschließlich* durch die rigorose Beugungstheorie erklärt werden kann.

Wir betrachten hierzu ein Metallstreifengitter in Silber mit den Parametern  $\lambda = 400 \text{ nm}$ ,  $d = 150 \text{ nm}$ ,  $h = 40 \text{ nm}$ ,  $n_{\text{Substrat}} = 1.5$ ,  $n_{\text{Superstrat}} = 1$  und senkrechtem Lichteinfall von der Substrat-Seite. Profiltiefe und normierte Gitterperiode sind somit nahezu identisch zu dem im vorigen Abschnitt besprochenen Gitter; der Unterschied liegt vornehmlich im Material (Silber statt Chrom). Die berechneten Transmissionen in Abhängigkeit vom Tastverhältnis zeigt Abbildung 10, und zwar wiederum für die rigorose Theorie (durchgezogen), für die vollständige EMT (gestrichelt) und für die vereinfachte EMT (gepunktete Linie). Die Transmissionen in TE liegen (ähnlich wie im vorangegangenen Beispiel) für alle drei Modelle relativ nahe beieinander. Jedoch zeigt sich, daß für  $f \rightarrow 1$  die TE-Transmission in der vereinfachten EMT einen falschen



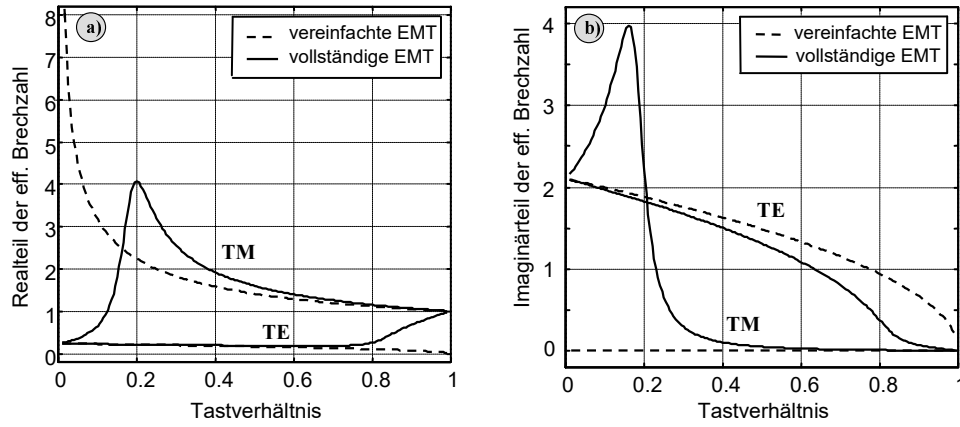


Abbildung 11: Realteil (a) und Imaginärteil (b) der effektive Brechzahlen für das Gitter aus Abb. 10, berechnet mit vollständiger EMT (durchgezogen) und vereinfachter EMT (gestrichelte Linie)

Wert ergibt. Dies ist verständlich, da die beim Übergang von Gleichung 17 zu Gleichung 22 vorgenommene Näherung für Tastverhältnisse nahe eins nicht mehr zutreffend ist.

Die TM-Transmissionen zeigen in dieser Darstellung große Unterschiede. Im Modell der vereinfachten EMT ergeben sich für  $f < 0.1$  wieder die bereits erwähnten Interferenz-Effekte. Ansonsten ist die TM-Transmission größer als die TE-Transmission, d.h. die vereinfachte EMT zeigt den normalen Polarisierungseffekt. Demgegenüber ergibt sich im Modell der vollständigen EMT, daß für  $f < 0.25$  die TM-Transmission kleiner als die TE-Transmission ist, d.h. ein inverser Polarisierungseffekt vorliegt; für alle  $f > 0.25$  ergibt sich der normale Polarisierungseffekt. Dieses Resultat ist qualitativ ähnlich zur rigorosen Rechnung, wo allerdings nahezu für alle Tastverhältnisse der inverse Effekt eintritt. Der normale Effekt wird hier lediglich in einem kleinen Bereich  $f > 0.88$  erreicht.

Das Auftreten des inversen Effektes im Modell der vollständigen EMT ist bemerkenswert. Es hängt an dieser Stelle zusammen mit der Brechzahl von Silber, die bei  $\lambda = 400\text{ nm}$  den Wert  $\hat{n} = 0.23 + 2.10i$  hat. Damit ergeben sich interessante Eigenschaften für die effektiven Brechzahlen. Abbildung 11 zeigt die effektiven Brechzahlen für die o.g. Gitterparameter als Funktion des Tastverhältnisses, und zwar berechnet entsprechend Gleichung 17 (vollständige EMT) bzw. Gleichung 22 (vereinfachte EMT). Wesentlich ist hier das Auftreten eines lokalen Maximums in  $\bar{n}_{\text{TM}}$  im Modell der vollständigen EMT für  $f = 0.2$  (Realteil) bzw.  $f = 0.17$  (Imaginärteil). Lokale Extrema in  $\bar{n}_{\text{TE}}$  oder  $\bar{n}_{\text{TM}}$  erscheinen zunächst ungewöhnlich.<sup>9</sup> Die einfache Ableitung von Gleichung 17 zeigt, daß im Falle dielektrischer Materialien ( $n_1$  und  $n_2$  reell) prinzipiell keine Extrema auftreten können.

<sup>9</sup>In [25] werden Maxima in  $\bar{n}_{\text{TM}}$  für Aluminium gezeigt, allerdings ohne weitere Beachtung und ohne genaue Angabe der zur Herleitung benutzten Formeln.

Im Falle komplexer Brechzahlen ist das Auftreten lokaler Extrema aber offensichtlich möglich. Die Überprüfung bei verschiedenen Wellenlängen bzw. für unterschiedliche Materialien (mit den bisher angenommenen Gitter-Parametern) ergibt, daß solche Extrema für eine ganze Reihe von Metallen auftreten. So zeigen Aluminium, Gold und Silber jeweils bei  $\lambda = 450\text{ nm}$  und  $\lambda = 633\text{ nm}$  und auch Chrom bei  $\lambda = 450\text{ nm}$  lokale Maxima sowohl in  $\Re\{\bar{n}_{\text{TM}}\}$  als auch in  $\Im\{\bar{n}_{\text{TM}}\}$  für Tastverhältnisse  $f$  nahe 0. In allen diesen Fällen zeigt die vollständige EMT auch einen inversen Effekt für Tastverhältnissen nahe 0, teilweise allerdings nur in einem sehr kleinen Bereich bzgl.  $f$ ; für alle größeren Tastverhältnisse ergibt sich der normale Polarisisationseffekt.

Andererseits zeigen z.B. Wolfram bei  $\lambda = 450\text{ nm}$  und  $\lambda = 633\text{ nm}$  sowie Chrom bei  $\lambda = 633\text{ nm}$  ein lokales Maximum in  $\Re\{\bar{n}_{\text{TM}}\}$ , aber nicht in  $\Im\{\bar{n}_{\text{TM}}\}$ . In diesen Fällen ergibt sich dann in der vollständigen EMT auch kein inverser Effekt. Dies legt die Vermutung nahe, daß im Rahmen der vollständigen EMT ein Zusammenhang zwischen dem Auftreten lokaler Maxima in  $\Re\{\bar{n}_{\text{TM}}\}$  und  $\Im\{\bar{n}_{\text{TM}}\}$  und dem Auftreten des inversen Effekts besteht. Jedoch ist dieser Zusammenhang nicht streng: Für Gold bei  $\lambda = 450\text{ nm}$  ergibt sich ein lokales Maximum nur in  $\Re\{\bar{n}_{\text{TM}}\}$ , nicht aber in  $\Im\{\bar{n}_{\text{TM}}\}$ ; die Berechnung der Transmissionen ergibt aber trotzdem einen inversen Effekt. Im Rahmen dieser Arbeit kann somit keine allgemeine phänomenologische Regel zum Auftreten des inversen Effekts in der vollständigen EMT formuliert werden. Eine solche allgemeine Regel müßte nicht nur für eine Vielzahl von Materialien und Wellenlängen, sondern auch für verschiedenste Gittergeometrien (verschiedene Profiltiefen und Profilformen) überprüft werden. Dies ist nicht das Ziel der vorliegenden Untersuchungen.

Die bisherigen Ergebnisse zusammenfassend, ergeben sich für Metallstreifengitter im sichtbaren Spektralbereich im Rahmen der EMT unterschiedliche Verhaltensweisen, die insbesondere das Auftreten von lokalen Extrema in den berechneten effektiven Brechzahlen und das Auftreten des inversen Polarisisationseffektes einschließen. Der inverse Effekt tritt dabei für ein begrenztes Intervall von  $f$  (ausgehend von 0) auf; für wachsende Tastverhältnisse ergibt sich immer ein Umschlagen zum normalen Polarisisationseffekt.

### 5.3.3 Grenzen der Aussagekraft der EMT

In Abschnitt 4.1 wurde festgestellt, daß die EMT keine zuverlässigen Resultate für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Gitter liefert. Dies soll noch einmal an einem Beispiel verdeutlicht werden.

In Abbildung 10 wurde bereits gezeigt, daß für einen festen Satz von Gitterparametern ein wesentlicher Unterschied zwischen EMT und rigoroser Berechnung besteht. Noch deutlicher wird dies, wenn veränderliche Gitterparameter angenommen werden. Hierzu soll ein Metallstreifengitter in Aluminium (bei  $\lambda = 400\text{ nm}$ ,  $d = 200\text{ nm}$ ,  $n_{\text{Substrat}} = 1.5$ ,  $n_{\text{Superstrat}} = 1$  und senkrechtem Lichteinfall von der Substrat-Seite) betrachtet werden, und zwar für die Metaldicken  $h = 20\text{ nm}$

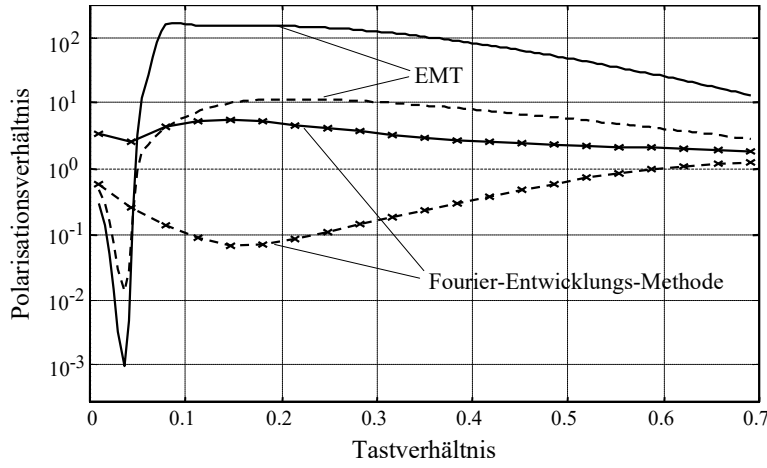


Abbildung 12: Polarisationsverhältnis eines Aluminium-Metallstreifengitters in Transmission mit  $d = 200 \text{ nm}$  bei  $\lambda = 400 \text{ nm}$ , berechnet mit vollständiger EMT und rigoroser Theorie für  $h = 20 \text{ nm}$  (gestrichelt) bzw.  $h = 40 \text{ nm}$  (durchgezogene Linie)

und  $h = 40 \text{ nm}$ . Abbildung 12 zeigt das resultierende Polarisationsverhältnis.

Für Tastverhältnisse  $f < 0.05$  zeigen die Berechnungen mit der vollständigen EMT für beide Werte der Metalldicke einen starken inversen Polarisisationseffekt, für alle größeren Tastverhältnisse ergibt sich der normale Effekt. Dieses Verhalten ist analog dem in Abbildung 10 gezeigten Verhalten für Silber. Sowohl im inversen als auch im normalen Bereich ist der Polarisisationseffekt für die größere Metalldicke stärker, ansonsten stimmen beide mit der vollständigen EMT berechnete Kurven im generellen Verhalten sehr stark überein.

Ganz anders ist das rigoros berechnete Verhalten. Hier ergibt sich ein großer qualitativer Unterschied in einem weiten Bereich bzgl.  $f$ , wo für die Metalldicke  $h = 20 \text{ nm}$  der inverse Effekt auftritt, während für  $h = 40 \text{ nm}$  der normale Polarisisationseffekt vorliegt. Erst für  $f > 0.58$  zeigt sich auch bei  $h = 20 \text{ nm}$  der normale Effekt (so daß qualitative Übereinstimmung zur vollständigen EMT besteht). Die in Abbildung 12 gezeigte rigoros berechnete Kurve für  $h = 40 \text{ nm}$  läßt überhaupt keinen inversen Effekt erkennen; die Rechnung für sehr kleine Tastverhältnisse zeigt aber, daß für  $f < 0.005$  doch ein inverser Effekt vorliegt. Somit gilt hier die Übereinstimmung zur vollständigen EMT bezüglich der Frage, ob überhaupt für irgendein Tastverhältnis ein inverser Effekt erreicht wird.

Bei der Modellierung von Gittern ist zunächst der gesamte Bereich der möglichen Tastverhältnisse interessant; für die experimentelle Realisierung dagegen liegt der hauptsächlich erreichbare Bereich zwischen ca.  $f = 0.2$  und  $f = 0.6$ . Die rigorose Rechnung zeigt, daß im vorliegenden Beispiel das Polarisationsverhalten in diesem Bereich entscheidend von der Metalldicke abhängt. Aus nur  $20 \text{ nm}$  Änderung der Dicke resultiert eine komplette Umkehrung des Polarisisationseffektes. In der vollständigen EMT dagegen ist dieser qualitativ bestimmende Einfluß der Metalldicke überhaupt nicht ersichtlich. Die Profiltiefe beeinflusst hier lediglich die

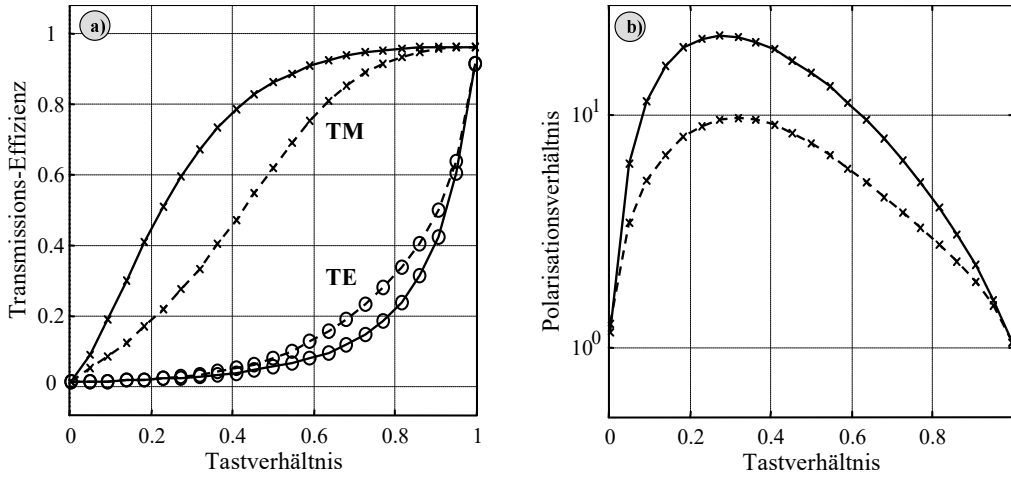


Abbildung 13: a) Rigoros berechnete Transmissionseffizienzen und b) Polarisationsverhältnis (halblogarithmische Darstellung) für ein Chrom-Metallstreifengitter mit  $h = 40$  nm bei  $\lambda = 633$  nm für  $d = 220$  nm (gestrichelt, somit  $\mathcal{N} = 0.35$ ) bzw.  $d = 63$  nm (durchgezogene Linie, somit  $\mathcal{N} = 0.1$ )

Stärke des normalen Polarisierungseffektes. Aus Abbildung 12 geht somit klar hervor, daß die vollständige EMT kein zuverlässiges Modellierungsverfahren für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Gitter darstellt.

## 5.4 Einfluß einzelner Parameter auf die optischen Eigenschaften

### 5.4.1 Transmissionseffizienz und Polarisationsverhältnis

In den bisherigen Beispielen wurden zur optischen Charakterisierung die Effizienzen bzw. das Polarisationsverhältnis (als Funktion des Tastverhältnisses) verwendet. Der Zusammenhang zwischen beiden Größen soll nun noch einmal näher betrachtet werden. Als Beispiel wird ein Metallstreifengitter in Chrom mit  $\lambda = 633$  nm,  $h = 40$  nm,  $n_{\text{Substrat}} = 1.5$ ,  $n_{\text{Superstrat}} = 1$  und senkrechtem Lichteinfall von der Substrat-Seite betrachtet (Abb. 13). Die Periode des Gitters sei zum einen  $d = 220$  nm (gestrichelte Linie in Abb. 13), andererseits  $d = 63$  nm (durchgezogene Linie). Bei der erstgenannten Periode ( $d = 220$  nm) handelt es sich also wieder um dasselbe Gitter wie in Abbildung 9, die normierte Gitterperiode beträgt hier  $\mathcal{N} = 0.35$ . Für die Periode  $d = 63$  nm ist dagegen  $\mathcal{N} = 0.1$ .

Aus Abbildung 13b wird deutlich, daß das maximale Polarisationsverhältnis für relativ kleine Tastverhältnisse  $f \approx 0.3$  erreicht wird. Dies ist einsichtig, da die weitgehend geschlossene Metallschicht eine wirksame Unterdrückung der TE-Transmission verursacht und der Nenner von Gleichung 4 somit sehr klein ist. Abbildung 13a zeigt aber, daß bei  $d = 220$  nm für so kleine Tastverhältnisse auch die TM-Transmission relativ niedrig liegt. Die eingestrahelte Intensität gelangt also nur wenig in die zur Nutzung gedachte nullte transmittierte Ordnung, sondern wird

vornehmlich reflektiert oder absorbiert. Eine Erhöhung der Transmissionseffizienzen ergibt sich natürlich für wachsende  $f$ , aber gleichzeitig wird dabei das Polarisationsverhältnis wegen der schnell steigenden TE-Effizienz wieder schlechter.

Dieses Verhalten ist bei der Realisierung des normalen Polarisationseffekts typisch für die hier betrachteten Gitter. Wird das Tastverhältnis gewählt, welches den besten Polarisations-effekt ergibt, ist die Effizienz relativ klein; wird das Tastverhältnis vergrößert, um die Effizienz zu erhöhen, sinkt das Polarisationsverhältnis ab.

Eine Erhöhung der Transmissionseffizienz bei Erhaltung eines guten Polarisationsverhältnisses ist also nicht durch Änderung des Tastverhältnisses möglich, sondern z.B. durch Reduzierung der Gitterperiode, d.h. Annäherung an das quasistatische Limit. Dies entspricht in Abb. 13 dem Übergang von der gestrichelten Kurve ( $d = 220 \text{ nm}$  bzw.  $\mathcal{N} = 0.35$ ) zur durchgezogenen Kurve ( $d = 63 \text{ nm}$  bzw.  $\mathcal{N} = 0.1$ ). An der Tatsache, daß das beste Polarisationsverhältnis für kleine  $f$  erreicht wird, ändert sich dabei aber nichts. Darüber hinaus wird das Polarisationsverhältnis auch für noch kleinere Perioden nicht beliebig groß, da es im quasistatischen Limit auch noch von der Profiltiefe abhängt, die hier nur  $40 \text{ nm}$  beträgt.

#### 5.4.2 Einfluß der normierten Gitterperiode

Der Einfluß der normierten Gitterperiode auf das Polarisationsverhalten soll für ein ähnliches Gitter wie im letzten Abschnitt untersucht werden ( $\lambda = 633 \text{ nm}$ ,  $n_{\text{Substrat}} = 1.5$ ,  $n_{\text{Superstrat}} = 1$ , senkrechter Lichteinfall von der Substrat-Seite, Chrom als Metall). Als Tastverhältnis wird  $f = 0.3$  gesetzt (was entsprechend Abb. 13 nahezu das optimale Polarisationsverhältnis ergibt), als Profiltiefe seien zwei verschiedene Werte  $h = 40 \text{ nm}$  und  $h = 80 \text{ nm}$  angenommen. Das Ergebnis zeigt Abbildung 14.

Bei Verkleinerung von  $\mathcal{N}$  ergibt sich im generellen Verlauf zunächst eine immer bessere Separation von TE- und TM-Polarisation durch das Gitter. Das Verhalten der beiden Polarisationskomponenten ist dabei aber unterschiedlich. Die TE-Transmission ist bereits für  $\mathcal{N} \leq 0.5$  weitgehend konstant und nahe null. Sie wird in diesem Bereich nicht mehr merklich durch  $\mathcal{N}$ , sondern im wesentlichen durch die Metalldicke bestimmt. Die TM-Transmission steigt dagegen für fallende  $\mathcal{N}$  *allmählich* an; erst für sehr kleine  $\mathcal{N} \leq 0.01$  erfolgt eine Annäherung an einen konstanten Grenzwert. Die möglichst gute Annäherung an das quasistatische Limit ist also erforderlich, um eine hohe TM-Transmission zu erzielen. Der Einfluß der Profiltiefe zeigt sich dabei auch hier, denn  $\eta_{\text{TM}}$  ist für  $h = 80 \text{ nm}$  etwas geringer als für  $h = 40 \text{ nm}$ .

Im resultierenden Polarisationsverhältnis ergibt sich ein größenordnungsmäßig konstanter Polarisations-effekt für  $\mathcal{N} \lesssim 0.2$ . Dieser (bezüglich  $\mathcal{P}$  und  $\eta_{\text{TM}}$ ) besonders günstige Bereich liegt jedoch derzeit außerhalb der experimentell erreichbaren Gitterparameter (siehe Abschnitt 5.1). Wie Abbildung 14 zeigt, kann aber auch für  $\mathcal{N} > 0.3$  eine gute Polarisationswirkung erreicht

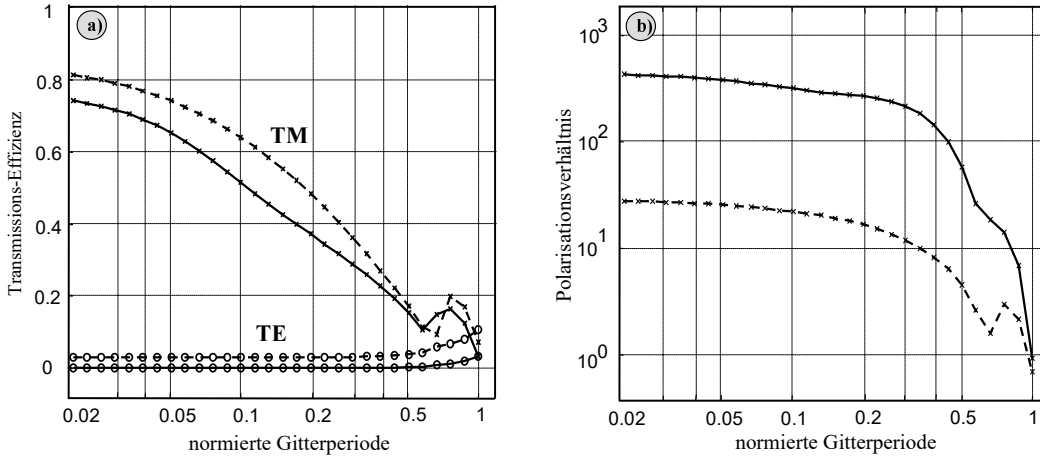


Abbildung 14: a) Rigos berechnete Transmissionseffizienzen (halblogarithmisch) und b) Polarisationsverhältnis (logarithmische Darstellung) für ein Chrom-Metallstreifengitter mit  $f = 0.3$  bei  $\lambda = 633$  nm für  $h = 40$  nm (gestrichelt) bzw.  $h = 80$  nm (durchgezogene Linie)

werden, wenn die Metalldicke  $h$  groß genug ist. Dabei ergibt die Verdoppelung der Metalldicke eine Verstärkung des Polarisationsverhältnisses um mehr als eine Größenordnung. Der Einfluß dieses Parameters soll daher im folgenden Abschnitt genauer untersucht werden.

Das in Abbildung 14 erkennbare Auftreten des inversen Effekts für  $\mathcal{N}$  nahe 1 wird ausführlich in Abschnitt 5.4.6 diskutiert.

### 5.4.3 Einfluß der Profiltiefe

Es sei ein Metallstreifengitter in Chrom mit  $f = 0.3$ ,  $n_{\text{Substrat}} = 1.5$ ,  $n_{\text{Superstrat}} = 1$ , bei  $\lambda = 633$  nm (senkrechter Lichteinfall von der Substrat-Seite) betrachtet. Die Transmission in Abhängigkeit von der Profiltiefe sowie das resultierende Polarisationsverhältnis zeigt Abbildung 15, und zwar für drei verschiedene Gitterperioden.

Man erkennt, daß das Polarisationsverhältnis generell mit wachsender Profiltiefe kontinuierlich ansteigt, allerdings nicht völlig gleichmäßig. Die Ursache hierfür liegt im unterschiedlichen Verhalten von  $\eta_{\text{TE}}$  und  $\eta_{\text{TM}}$ . Die TE-Transmission fällt monoton mit wachsendem  $h$ , und zwar näherungsweise (aber nicht genau) exponentiell. Für eine möglichst gute Unterdrückung der TE-Transmission muß also eine möglichst große Metalldicke gewählt werden.

Die TM-Transmission zeigt dagegen teilweise bemerkenswerte Abweichungen vom monotonen Verhalten. Besonders deutlich wird dies für die Periode  $d = 340$  nm (gepunktete Linie in Abb. 15), wo sich für  $h = 155$  nm ein lokales Transmissions-Maximum in TM-Polarisation ergibt. Ein derartiger Effekt wird in [31] mittels TM-Polarisations-Resonanz erklärt. In der genannten Veröffentlichung wird die Polarisationswirkung von Aluminium-Metallstreifengittern im nahen Infrarot-Bereich ( $\lambda = 780$  nm) untersucht. Die Autoren zeigen, daß für eine Gitterperiode von  $d = 390$  nm  $= \lambda/2$  ein ausgeprägtes lokales Maximum in der TM-Polarisation bei  $h = 280$  nm

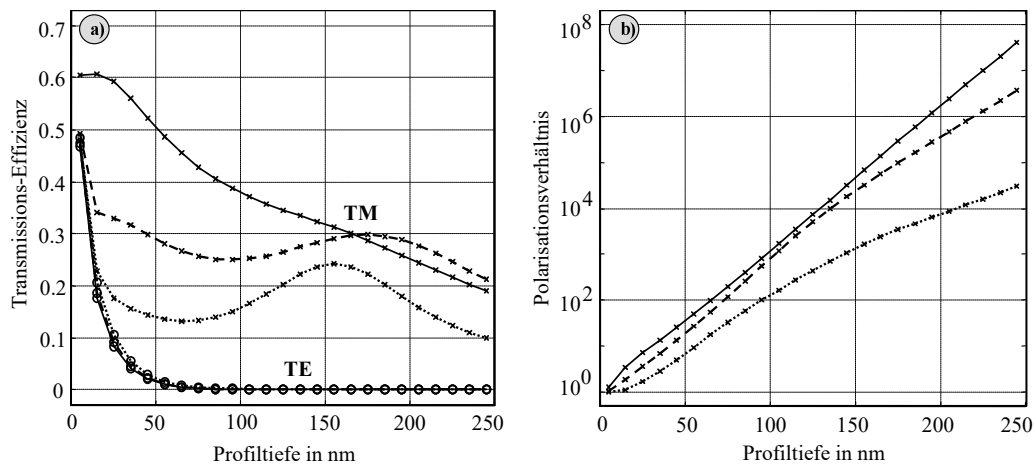


Abbildung 15: a) Rigoros berechnete Transmissionseffizienzen und b) Polarisationsverhältnis (halblogarithmisch) für ein Chrom-Metallstreifengitter mit  $f = 0.3$  bei  $\lambda = 633$  nm für  $d = 340$  nm (gepunktet),  $d = 220$  nm (gestrichelt) bzw.  $d = 100$  nm (durchgezogene Linie)

existiert (analog der Kurve für  $d = 340$  nm in Abb. 15), und kommen zu der Schlußfolgerung, daß diese Metallstreifendicke somit das Optimum für einen Metallstreifen-Polarisator darstellt, da das gewünschte Polarisationsverhältnis durch freie Wahl des Tastverhältnisses  $f$  eingestellt werden kann, für jedes dieser Polarisationsverhältnisse durch Wahl der optimalen Dicke aber die TM-Transmission optimiert wird. Diese Überlegung scheint zunächst schlüssig, ist aber in ihrer Allgemeinheit falsch.

Die Ursache dieses Fehlers liegt darin, daß die Gitterperiode  $d$  in der Veröffentlichung willkürlich auf  $d = \lambda/2$  fixiert wird und nicht als freier Parameter betrachtet wird, der zur Optimierung der optischen Eigenschaften zur Verfügung steht. Wenn die Periode als variierbarer Parameter angesehen wird, ergeben sich jedoch andere Verhältnisse. Abbildung 15 (Kurve für  $d = 100$  nm) zeigt beispielsweise, daß nicht für alle Gitterperioden überhaupt ein lokales Maximum in der TM-Transmission existiert, d.h. die Optimierung könnte für  $d = 100$  nm gar nicht durchgeführt werden. Gleichzeitig ergeben sich jedoch für  $d = 100$  nm bei sonst gleichen Parametern sowohl eine höhere TM-Transmission als auch ein höheres Polarisationsverhältnis als bei  $d = 340$  nm. Somit stellt ein lokales Maximum in TM-Transmission nicht das optimale Design eines allgemeinen Metallstreifen-Polarisators dar. Diese Aussage ist nur gültig, wenn die Periode fixiert ist und für diese Periode ein lokales Maximum in der TM-Transmission existiert.

Es ergibt sich daher die Frage, ob es zwingende Gründe für die Annahme einer festen Periode geben kann. In [31] werden hierzu gar keine Überlegungen angestellt, sondern der Fakt wird als solcher angenommen. Vom Standpunkt der Herstellbarkeit ergeben sich keine zwingenden Gründe für eine derartige Annahme. Sowohl in [31] als auch im Rahmen dieser Arbeit werden die Gitter elektronenstrahlolithografisch erzeugt, und es sind wesentlich kleinere Gitterperioden als  $d = 390$  nm realisierbar. Die Schwierigkeit bei der Herstellung wird vielmehr vor allem durch

das Aspektverhältnis  $\mathcal{A}$  ausgedrückt. Es ergibt sich also die modifizierte Problemstellung, ob das in [31] als optimal bezeichnete Design unter der Annahme eines konstanten Aspektverhältnisses tatsächlich das bestmögliche ist.

In der folgenden Tabelle (Zeile 1 bis 3) sind daher noch einmal alle Parameter der Gitter aufgeführt, die in [31] als optimal bezeichnet werden. Dabei finden sich in der ersten Zeile die experimentell erreichten Ergebnisse und in der zweiten Zeile die rigoros berechneten Resultate für dieselben Gitterparameter. Da die rigorose Rechnung jedoch eine andere Profiltiefe für das TM-Transmissions-Maximum ergibt, als sie experimentell gefunden wurde, beinhaltet Zeile 3 die Parameter aus [31] für diese Metallstreifendicke. In den Zeilen 4 und 5 werden eigene Rechnungen zu denselben Parametern gezeigt. Bezüglich der TM-Transmission stimmen sie gut mit den Zeilen 2 und 3 überein. Die Abweichungen in  $\mathcal{P}$  werden vermutlich durch Unterschiede in der angenommenen Brechzahl des Metalls verursacht, die für Aluminium etwas unsicher ist [92]. (Für die eigenen Rechnungen wurde  $\hat{n} = 2.66 + 8.58i$  bei  $\lambda = 780 \text{ nm}$  benutzt.)

Nr.	Gitter	$d$ in nm	$h$ in nm	$f$	$\mathcal{A}$	$\mathcal{P}$	$\eta_{\text{TM}}$
1	experimentelle Ergebnisse in [31]	390	285	0.35	2.1	700	62%
2	wie Nr. 1, aber berechnet in [31]	390	285	0.35	2.1	40000	50%
3	berechnet für Optimaldicke in [31]	390	230	0.35	1.7	9000	69%
4	eigene Rechnung analog Nr. 2	390	285	0.35	2.1	76000	49%
5	eigene Rechnung analog Nr. 3	390	230	0.35	1.7	16000	68%
6	2. bzw. 4. Zeile optimiert	335	246	0.35	2.1	123000	70%
7	3. bzw. 5. Zeile optimiert	375	222	0.35	1.7	17000	67%

Die Zeilen 6 und 7 der Tabelle enthalten nun als Vergleich die Daten für modifizierte Gitter, bei denen die Fixierung auf  $d = \lambda/2$  und die in [31] als optimal bezeichneten Profiltiefen verlassen werden. Beide Parameter werden so verändert, daß sich dasselbe Aspektverhältnis wie in der 2. bzw. 3. Zeile ergibt. Diese Gitterparameter resultieren aus einer Optimierung entsprechend Abb. 16. Aus dieser Abbildung erkennt man, daß sich bei Annahme eines konstanten Aspektverhältnisses  $\mathcal{A}$  ein optimales Design (lokales Maximum in  $\eta_{\text{TM}}$  bzw.  $\mathcal{P}$ ) finden läßt, dessen Lage aber stark vom aktuellen Wert von  $\mathcal{A}$  abhängt. Ferner erkennt man (Kurve für  $\mathcal{A} = 1.7$ ), daß die Maxima in  $\eta_{\text{TM}}$  nicht notwendigerweise an derselben Stelle liegen wie in  $\mathcal{P}$ . In die obige Tabelle wurden die Parameter für das optimale Polarisationsverhältnis übernommen.

Aus dem Vergleich der Gitterparameter von Zeile 6 und 4 bzw. Zeile 7 und 5 der Tabelle erkennt man, daß die Optimierung für konstante Aspektverhältnisse eine mehr oder weniger starke Veränderung gegenüber den in [31] genannten Parametern ergibt, die sehr deutlich vom konkreten Aspektverhältnis abhängt. Für das Aspektverhältnis  $\mathcal{A} = 1.7$  ist die Veränderung eher marginal, und das Polarisationsverhältnis wird nur unbedeutend verbessert. Für das Aspekt-



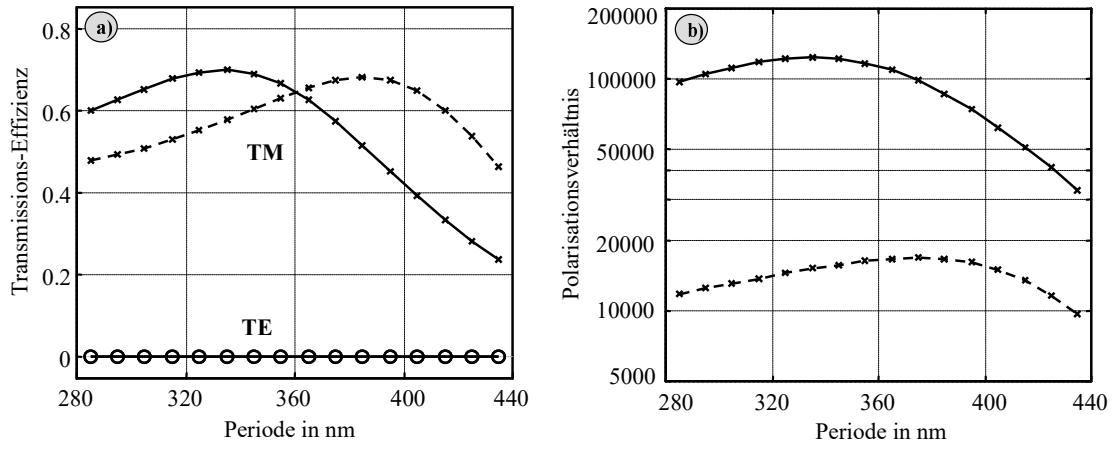


Abbildung 16: a) Rigoros berechnete Transmissionseffizienzen und b) Polarisationsverhältnis (halblogarithmisch) für ein Aluminium-Metallstreifengitter mit  $f = 0.35$  bei  $\lambda = 780$  nm für  $\mathcal{A} = 1.7$  (gestrichelt) bzw.  $\mathcal{A} = 2.1$  (durchgezogene Linie). Die Annahme konstanter Aspektverhältnisse  $\mathcal{A}$  bedeutet, daß bei Variation der Periode  $d$  (x-Achse) gleichzeitig die Profiltiefe  $h$  verändert wird.

verhältnis  $\mathcal{A} = 2.1$  führt die Optimierung auf deutlich andere geometrische Gitterparameter, und die optischen Eigenschaften (sowohl  $\mathcal{P}$  als auch  $\eta_{\text{TM}}$ ) werden wesentlich verbessert.

Generell kann man schlußfolgern, daß die Wirkung der drei geometrischen Parameter (Periode  $d$ , Profiltiefe  $h$  und Tastverhältnis  $f$ ) nicht isoliert voneinander, sondern nur im Verbund betrachtet werden kann, wobei die Freiheitsgrade bzw. die Einschränkungen derselben genau spezifiziert werden müssen. Insbesondere hängt die Auswirkung der Veränderung *eines* Parameters immer davon ab, welche Werte die anderen beiden Parameter haben. Hierzu betrachten wir noch einmal die Transmissionseffizienzen in Abbildung 15. Für eine Profiltiefe von  $h = 200$  nm ergibt sich ein Absinken der Effizienz, wenn die Gitterperiode von  $d = 220$  nm auf  $d = 100$  nm verkleinert wird. Dieses Verhalten ist genau entgegengesetzt zum allgemeinen Trend, der bei Annäherung an das quasistatische Limit eine Erhöhung der TM-Transmission erwarten läßt (s. Abb. 14). Derartige Abweichungen vom generellen Verhalten treten für die hier betrachteten Gitter immer wieder auf. Sie zeigen, daß es keine einfache Regel gibt, durch die das optische Verhalten der betrachteten Gitter allgemein beschrieben werden könnte (sondern es tatsächlich immer wieder der rigorosen Modellierung bedarf). Daher gibt es auch kein allgemeingültiges optimales Design für einen Metallstreifen-Polarisator. Eine Optimierung kann nur erfolgen, wenn festgelegt wird, welche optische Funktion bzw. Größe optimiert werden soll, und welche festen Randbedingungen vorgegeben sind.

#### 5.4.4 Einfluß der Wellenlänge

Das optische Verhalten der betrachteten Gitter wird durch die Wellenlänge in zweierlei Hinsicht beeinflusst. Zum einen entspricht eine Veränderung der Wellenlänge einer Veränderung der normierten Gitterperiode  $\mathcal{N}$ , die bereits in Abschnitt 5.4.2 betrachtet wurde. Dort ist in Abbildung 14 ersichtlich, daß eine Änderung von  $\mathcal{N}$  um den Faktor 2 (beispielsweise Änderung von  $\lambda = 360 \text{ nm}$  auf  $\lambda = 720 \text{ nm}$ , d.h. Durchlaufen des gesamten sichtbaren Spektralbereichs) keine qualitativen Änderungen von  $\eta_{\text{TM}}$  bzw.  $\mathcal{P}$  verursacht, falls die normierte Gitterperiode im Bereich  $\mathcal{N} \ll 1$  liegt. Ist aber  $\mathcal{N} > 0.3$  (was dem hier experimentell erreichbaren Bereich entspricht), kann eine derartige Veränderung von  $\mathcal{N}$  bzw.  $\lambda$  um den Faktor 2 einen sehr wesentlichen Einfluß auf das optische Verhalten bis hin zu qualitativen Veränderungen (Umschlag vom normalen zum inversen Polarisierungseffekt, s. Abschnitt 5.4.6) bewirken.

Durch geeignete Wahl von  $d$  kann erreicht werden, daß bei Variation von  $\lambda$  (bzw.  $\mathcal{N}$ ) keine qualitative Änderung des Polarisationsverhaltens stattfindet. Zum Beispiel ergibt sich für  $d = 190 \text{ nm}$  und die Parameter aus Abbildung 14 ( $h = 40 \text{ nm}$ ) zwischen  $\lambda = 380 \text{ nm}$  ( $\mathcal{N} = 0.5$ ) und  $\lambda = 700 \text{ nm}$  ( $\mathcal{N} = 0.27$ ) überall der normale Polarisierungseffekt mit Polarisationsverhältnissen zwischen  $\mathcal{P} = 4$  und  $\mathcal{P} = 15$ . Ein solches Metallstreifengitter kann also (unter Beachtung dieser Veränderung in  $\mathcal{P}$ ) zur Polarisierung von Licht nicht nur bei einer bestimmten Wellenlänge, sondern für alle Wellenlängen im sichtbaren Spektralbereich eingesetzt werden, insbesondere auch für Weißlicht. Bei kleinen Abweichungen in  $\lambda$  ändern sich die optischen Eigenschaften fast gar nicht, so daß z.B. die Verwendung zusammen mit unstabilisierten Laserdioden keinerlei Probleme bereitet. Dies unterscheidet diese Gitter von anderen polarisierenden mikrooptischen Elementen, die auf resonanzartigen Effekten basieren und schon bei kleinen Abweichungen von der Designwellenlänge nicht mehr verwendbar sind (z.B. dielektrische Schmalbandfilter [1] oder Metallstreifen-Polarisatoren basierend auf dem inversen Polarisierungseffekt [93]).

Der andere Einfluß der Wellenlänge besteht implizit über die Brechzahlen der beteiligten Materialien. Während für die Dielektrika (Substrat und Superstrat) kaum eine Wellenlängenabhängigkeit der Brechzahl bzw. der Dielektrizitätskonstante besteht, ist sie für die meisten Metalle im sichtbaren Spektralbereich deutlich spürbar. Der Wert von  $\hat{n}$  bzw.  $\hat{\epsilon}$  sowie ihre Veränderung innerhalb des sichtbaren Spektralbereichs ist für die verschiedenen Metalle sehr unterschiedlich. Beides soll gemeinsam im folgenden Abschnitt untersucht werden.

#### 5.4.5 Einfluß des verwendeten Metalls

Das optische Verhalten von Metallstreifengittern wird qualitativ und quantitativ durch das verwendete Metall bestimmt. Für drei ausgewählte Materialien ist dies in Abbildung 17 zu sehen. Für  $\mathcal{N} \lesssim 0.1$  ergibt sich in allen drei Fällen der normale Polarisierungseffekt ( $\eta_{\text{TM}} > \eta_{\text{TE}}$ ). Am

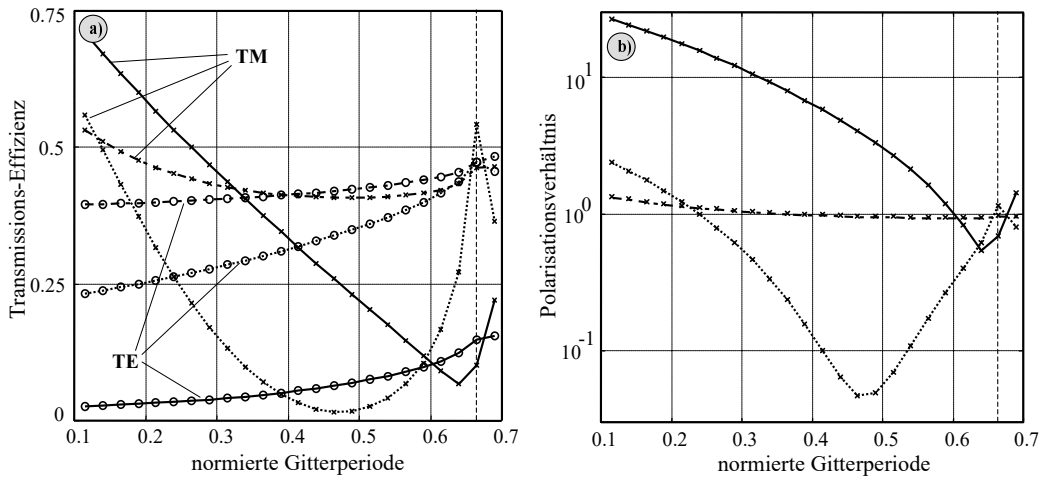


Abbildung 17: a) Rigoros berechnete Transmissionseffizienzen und b) Polarisationsverhältnis (halblogarithmisch) für Metallstreifengitter mit  $h = 40$  nm,  $f = 0.4$  und  $\lambda = 480$  nm in Chrom (durchgezogen), Gold (gestrichelt) bzw. Silber (gepunktete Linie). Die senkrechte gestrichelte Linie bei  $\mathcal{N} = 0.67$  markiert den Rayleigh-Punkt.

rechten Rand der Diagramme befindet sich der ausgezeichnete Punkt  $\mathcal{N}_R = 1/n_{\text{Substrat}}$ , der die Grenze des „Zero-Order“-Bereichs darstellt und im folgenden als Rayleigh-Punkt bezeichnet werden soll (im Diagramm durch eine senkrechte gestrichelte Linie markiert). Auf die in der Umgebung dieses Punktes auftretenden speziellen Effekte wird im nächsten Abschnitt eingegangen.

Im dazwischen liegenden Bereich von  $\mathcal{N}$  ergeben sich starke Unterschiede. Für Chrom liegt fast vollständig ein starker normaler Polarisierungseffekt vor, für Silber besteht ein ausgeprägter inverser Effekt für  $0.24 < \mathcal{N} < 0.65$ , und Gold zeigt einen schwachen Polarisierungseffekt, der bei  $\mathcal{N} = 0.4$  vom normalen zum inversen Verhalten wechselt.

Die Untersuchung verschiedener Materialien ergibt, daß für das quasistatische Limit immer der normale Polarisierungseffekt erreicht wird. Für den nicht-quasistatischen „Zero-Order“-Bereich  $0.1 < \mathcal{N} < 1/n_{\text{Substrat}}$  (der den hier experimentell relevanten Bereich darstellt) hängt das Polarisationsverhalten von *allen* Parametern ab, insbesondere aber von der Profiltiefe  $h$ . Für sehr dünne Metallschichten ist die TE-Transmission  $\eta_{\text{TE}}$  so groß, daß sie in einem weiten Bereich bzgl.  $\mathcal{N}$  die TM-Transmission  $\eta_{\text{TM}}$  übersteigen kann, so daß sich ein inverser Polarisierungseffekt ergibt. Dies ist in Abbildung 17 für Silber sehr gut zu erkennen. Ein solcher dominierender inverser Effekt kann auch für Chrom realisiert werden, wenn die Metalldicke von  $h = 40$  nm auf  $h = 10$  nm reduziert wird. Ist das Metall hingegen genügend dick, wird die TE-Transmission wirksam unterdrückt und ist in einem weiten Bereich bzgl.  $\mathcal{N}$  kleiner als die TM-Transmission, so daß sich der normale Polarisierungseffekt ergibt. Abbildung 17 zeigt dieses Verhalten für Chrom. Es ergibt sich auch für Silber, wenn  $h$  von 40 nm auf 100 nm vergrößert wird.

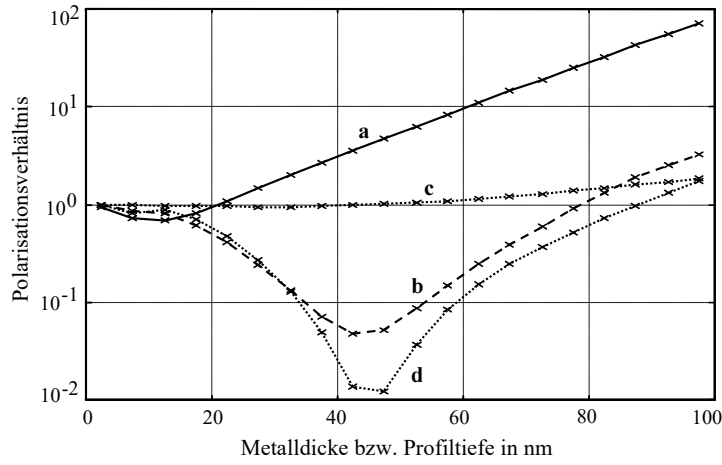


Abbildung 18: Rigos berechnetes Polarisationsverhältnis als Funktion der Profiltiefe  $h$  für Metallstreifengitter mit  $\mathcal{N} = 0.5$ ,  $f = 0.4$  für (a) Chrom bei  $\lambda = 480$  nm, (b) Silber bei  $\lambda = 480$  nm, (c) Gold bei  $\lambda = 480$  nm und (d) Gold bei  $\lambda = 633$  nm

Das Auftreten des normalen oder inversen Polarisierungseffektes hängt also im hier untersuchten Bereich  $0.1 \lesssim \mathcal{N} < 1/n_{\text{Substrat}}$  davon ab, ob die Metalldicke  $h$  eine genügend starken Unterdrückung der TE-Transmission bewirkt. Für große Metalldicken ist dies immer der Fall, so daß sich für  $h \rightarrow \infty$  immer der normale Polarisierungseffekt ergibt (s. Abb. 18).

Wie groß der Bereich bzgl.  $h$  ist, für den ein inverser Effekt auftreten kann, ist von der Brechzahl des Materials, d.h. von der Art des Metalls und von der Wellenlänge abhängig. Für die bereits betrachteten Metalle Chrom, Silber und Gold bei  $\lambda = 480$  nm zeigt sich dies ebenfalls sehr deutlich in Abb. 18 (Kurve a-c). Zusätzlich wurde noch Gold bei  $\lambda = 633$  nm untersucht (Kurve d). Im Vergleich zu Kurve c ergibt sich ein deutliche verstärkter inverser Polarisierungseffekt, was durch die veränderte Brechzahl ( $\hat{n} = 1.18 + 1.53i$  bei  $\lambda = 480$  nm,  $\hat{n} = 0.12 + 3.29i$  bei  $\lambda = 633$  nm) verursacht wird. Eine experimentelle Bestätigung dieses starken inversen Polarisierungseffektes für Gold wurde in [94] durchgeführt.

Wie bereits erwähnt, ist das Auftreten des normalen bzw. inversen Effektes nicht nur von Profiltiefe, Wellenlänge und Brechzahlen abhängig, sondern wird auch von allen anderen Parametern beeinflusst. Fixiert man die Parameter (zumindest weitgehend), kann man aber eine gewisse Übersicht über das Verhalten der verschiedenen Metalle gewinnen. Für einen im Rahmen dieser Arbeit relativ typischen Parameterbereich ( $\lambda = 500$  nm ... 550 nm,  $\mathcal{N} = 0.4 \dots 0.5$ ,  $h \approx 40$  nm,  $f = 0.3 \dots 0.5$ ,  $n_{\text{Substrat}} = 1.5$ ,  $n_{\text{Superstrat}} = 1$ , senkrechter Lichteinfall von der Substrat-Seite) ergibt sich für acht untersuchte Metalle:

- Einen ausgeprägten normalen Polarisierungseffekt zeigen Aluminium, Wolfram, Chrom und Platin;
- einen ausgeprägten inversen Polarisierungseffekt zeigen Silber und Kupfer;
- einen schwachen Polarisierungseffekt bzw. uneinheitliches Verhalten zeigen Gold und Nickel.

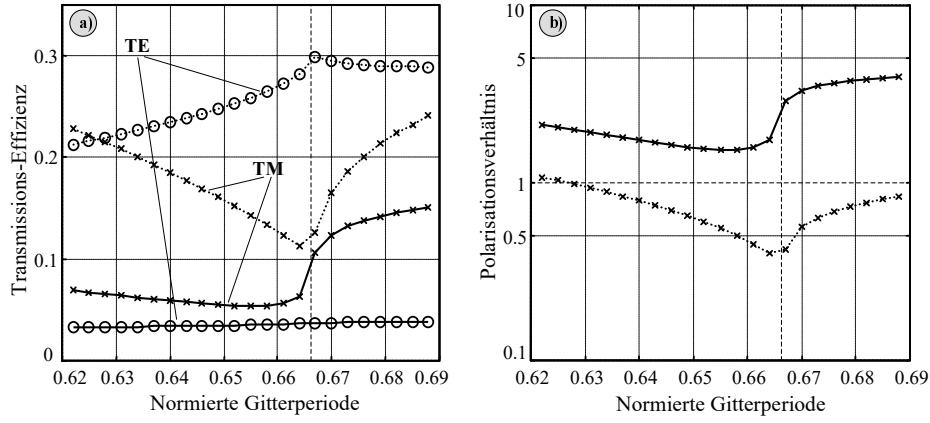


Abbildung 19: a) Rigoros berechnete Transmissionseffizienzen und b) Polarisationsverhältnis (halblogarithmisch) für Metallstreifengitter in Chrom mit  $h = 40$  nm bei  $\lambda = 625$  nm für  $f = 0.25$  (durchgezogen) bzw.  $f = 0.5$  (gepunktete Linie). Die senkrechte gestrichelte Linie bei  $\mathcal{N} = 0.667$  markiert den Rayleigh-Punkt.

Eine solche Übersicht ist für die Auswahl eines geeigneten Materials für die experimentelle Arbeit sehr wichtig.

#### 5.4.6 Inverser Effekt und Wood-Anomalien

In Abbildung 17 ist erkennbar, daß am Rayleigh-Punkt  $\mathcal{N}_R = 1/n_{\text{Substrat}}$  bzw. in seiner unmittelbaren Umgebung qualitative Änderungen des Polarisationseffektes (Übergang zu inversem Effekt für Chrom, zu normalem Effekt für Silber) stattfinden können. Sie werden durch starke lokale Schwankungen der Transmissionseffizienzen (insbesondere von  $\eta_{\text{TM}}$ ) hervorgerufen. Derartige plötzliche Variationen der Transmissionseffizienz wurden erstmals von Wood beobachtet [95] und daher Wood-Anomalien genannt. Rayleigh erklärte den Effekt 1907 durch die Umverteilung der Energie bzw. Lichtintensität zwischen den verschiedenen Beugungsordnungen an Punkten, wo eine Beugungsordnung zu propagieren beginnt bzw. evaneszent wird<sup>10</sup> [96]. Eine derartige Umverteilung der Energie bzw. Lichtintensität findet auch im vorliegenden Fall statt, denn für  $\mathcal{N} < 1/n_{\text{Substrat}}$  propagiert ausschließlich die 0. Beugungsordnung, während für  $\mathcal{N} \geq 1/n_{\text{Substrat}}$  die  $\pm 1$ . Beugungsordnung in Reflexion propagiert. Der zu beobachtende Umschlag vom normalen zum inversen Polarisationseffekt ist also eng mit dem Effekt der Wood-Anomalie verknüpft und basiert insbesondere auf der unterschiedlichen Erscheinung dieses Effekts für TE- und TM-Polarisation.

Die Abbildung 19 zeigt noch einmal die nähere Umgebung von  $\mathcal{N}_R = 1/n_{\text{Substrat}}$ . Für die Transmissionseffizienzen kann man zwei wesentliche Eigenschaften erkennen, die auch in [96]

<sup>10</sup>In [96] wird dafür der anschaulich sehr schöne Ausdruck „Eine Beugungsordnung verschwindet am Horizont“ gebraucht.

erwähnt werden: Erstens, daß sich am Rayleigh-Punkt nicht genau ein Maximum oder Minimum in der Effizienz befindet, sondern meist die Stelle des stärksten Gradienten; und zweitens, daß die Anomalie stärker für TM-Polarisation in Erscheinung tritt als für TE-Polarisation.

Die Umgebung von  $\mathcal{N}_R = 1/n_{\text{Substrat}}$  ist ein sehr interessanter Bereich für die experimentelle Untersuchung, weil hier für ein Material, das überwiegend den normalen Polarisierungseffekt zeigt (Chrom, s. Abb. 17), der Übergang zum inversen Effekt durch eine geringe Änderung der Gitterperiode erreicht werden kann. Experimentelle Resultate hierzu werden in Abschnitt 6.1.2 gezeigt. Wie Abbildung 19 zeigt, ist das optische Verhalten am Rayleigh-Punkt aber noch durch andere Parameter beeinflussbar (z.B. das Tastverhältnis), und der inverse Polarisierungseffekt kann verstärkt bzw. unterdrückt werden. Eine qualitative Änderung des Polarisationsverhaltens an diesem Punkt erfolgt also nicht zwingend.

#### 5.4.7 Abschließende Bemerkungen

Auch wenn in den vorangegangenen Abschnitten eine ganze Reihe von Beispielen modelliert wurde, ist das vollständige Erfassen des gesamten Wertebereichs der sieben in Abschnitt 5.2 genannten Parameter nicht möglich. An dieser Stelle soll daher keine Komplettierung vorgenommen werden, sondern nur kurz auf drei bisher nicht genannte Aspekte eingegangen werden.

In allen bisherigen Rechnungen wurde immer von senkrechtem Lichteinfall ausgegangen. Die rigorose Rechnung zeigt, daß sich für kleine Abweichungen hiervon ( $\theta < 10^\circ$ ) bei kleinen Profiltiefen  $h \ll \lambda$  nur marginale Veränderungen der Effizienzen bzw. des Polarisationsverhältnisses ergeben, solange  $\mathcal{N}$  genügend weit vom Rayleigh-Punkt  $\mathcal{N}_R = 1/n_{\text{Substrat}}$  entfernt ist. Das Polarisationsverhalten bei  $\mathcal{N}_R$  wird allerdings durch eine Änderung des Einfallswinkels sehr stark beeinflusst, weil dieser Punkt dann nicht mehr genau die Grenze des Bereichs darstellt, in dem ausschließlich die 0. Beugungsordnung propagiert. Vielmehr existiert bei nichtsenkrechtem Lichteinfall eine propagierende  $-1$ . Beugungsordnung in Reflexion schon für

$$\mathcal{N} > \frac{1}{n_{\text{Substrat}}(1 + \sin \theta)} \quad (65)$$

während die  $+1$ . Beugungsordnung in Reflexion erst für

$$\mathcal{N} > \frac{1}{n_{\text{Substrat}}(1 - \sin \theta)} \quad (66)$$

zu propagieren beginnt. Die bei senkrechtem Lichteinfall vorhandene Wood-Anomalie bei  $\mathcal{N}_R$  spaltet sich also in zwei getrennte Anomalien auf, und das Polarisationsverhalten an diesen Stellen ändert sich stark. Eine allgemeingültige Aussage darüber ist nicht mehr möglich, sondern muß in jedem konkreten Fall einzeln berücksichtigt werden.

Ebenfalls einen gewissen Einfluß auf das Polarisationsverhalten hat die Substratbrechzahl. Die effektiv wirksame Wellenlänge auf der Substratseite ist  $\lambda/n_{\text{Substrat}}$ . Um möglichst nahe am

quasistatischen Limit zu arbeiten, muß (bei fester Periode  $d$ )  $n_{\text{Substrat}}$  möglichst klein sein. Dann ist die Arbeit ohne jegliches Substrat ( $n_{\text{Substrat}} = 1$ ) theoretisch am günstigsten, aber nicht praktikabel, da die Herstellung freitragender Metallstreifengitter mit Metallstreifen-Querschnitten von ca.  $(100\text{ nm})^2$  oder weniger unmöglich erscheint. Die Benutzung von üblichen Gläsern mit  $n \approx 1.5$  oder Quarz ist daher die beste verbleibende Variante; der Einsatz höherbrechender Substrate wäre kontraproduktiv. Falls an ganz bestimmten Stellen von  $\mathcal{N}$  gearbeitet werden soll (z.B. die Untersuchung der Wood-Anomalie), ist die Benutzung von Substraten mit genau definierter Brechzahl (z.B. Quarz) sinnvoll.

Bei der bisherigen Modellierung wurde ausschließlich der Einsatz in Transmission betrachtet. Dies entspricht der üblichen Verwendung des Metallstreifen-Polarisators, denn die Nutzung in Transmission und bei senkrechtem Einfall erlaubt das einfache Einfügen von Metallstreifen-Polarisatoren in bestehende optische Anordnungen bzw. die Realisierung sehr einfacher Strahlengänge (keine Veränderung der optischen Achse, keine zusätzlichen Strahlteiler). Polarisationseffekte durch Metallstreifengitter können aber prinzipiell auch in Reflexion realisiert werden. Im quasistatischen Limit bzw. für große Metallschichtdicken sind dabei üblicherweise die Rollen von TE- und TM-Polarisation vertauscht, d.h.  $\eta_{\text{TE}}^R > \eta_{\text{TM}}^R$ . Im nicht-quasistatischen Bereich ist das optische Verhalten ähnlich komplex wie für Transmission. Dabei kann i.a. nicht geschlossen werden, daß das Verhalten in Reflexion komplementär zur Transmission ist, weil neben Reflexion und Transmission auch noch Absorption in den Metallstreifen erfolgt, die für TE- und TM-Polarisation stark verschieden sein kann.

## 5.5 Schlußfolgerungen für die experimentelle Arbeit

### 5.5.1 Materialauswahl

Das Ziel bei der Herstellung von Metallstreifen-Polarisatoren in der vorliegenden Arbeit ist einerseits die experimentelle Untersuchung eines möglichst großen Bereiches von Gitterparametern und andererseits die Realisierung möglichst starker Polarisationseffekte, die auch für potentielle Anwendungen ausgenutzt werden können. Beschränkungen für beide Gesichtspunkte ergeben sich aus der zur Verfügung stehenden Herstellungstechnologie (s. Abschnitt 3.1).

Ein wesentlicher Punkt ist die Art des Metalls, das experimentell benutzt wird. Es sollte einerseits möglichst günstige und stabile Eigenschaften im Herstellungsprozeß haben und reproduzierbare optische Ergebnisse liefern, andererseits einen möglichst deutlich ausgeprägten (normalen oder aber inversen) Polarisationseffekt für die experimentell erreichbaren Gitterparameter aufweisen. Für die vorliegende Arbeit wurde fast ausschließlich Chrom verwendet. Chrom ist ein Standardmaterial in der Mikrostrukturierung (insbesondere in der Maskenherstellung) mit bekannten und stabilen Eigenschaften in den verschiedenen Herstellungsschritten. Wie in

Abschnitt 5.4.5 erwähnt, zeigt es für die hier relevanten Parameter überwiegend einen starken normalen Polarisierungseffekt. Somit werden beide Anforderungen bei der Materialauswahl gut erfüllt.

Daneben wurden einige wenige Experimente mit Aluminium und Silber durchgeführt. Die rigorose Modellierung zeigt, daß Aluminium ebenfalls überwiegend einen normalen Polarisierungseffekt zeigt, der (bei gleichen Parametern) sogar deutlich stärker als für Chrom sein kann. Für Silber ergibt sich dagegen überwiegend ein starker inverser Effekt (s. Abb. 17 und 18). Die experimentelle Untersuchung beider Metalle wäre also ebenfalls interessant. Aufgrund der in Abschnitt 3.1.5 geschilderten Schwierigkeiten war aber eine technologisch reproduzierbare Realisierung solcher Metallstreifengitter bei Anwendung des Trockenätzens nicht möglich. Daher wurden einige Metallstreifengitter in Silber mit dem „Lift-off“-Verfahren realisiert.

### 5.5.2 Optimierung der Gitterparameter

Auftreten und Stärke des inversen Effekts hängen in jedem Falle sehr empfindlich von allen Gitterparametern ab. Eine Analyse bzw. Optimierung ist daher nur am konkreten Beispiel möglich. Dabei ist insbesondere auch jeweils der Einfluß und die nötige Bandbreite der Lichtwellenlänge  $\lambda$  zu beachten. Für einen speziellen Wert oder in einem relativ begrenzten Intervall der Wellenlänge können invers polarisierende Metallstreifengitter mit gutem Polarisierungseffekt gefunden werden. Es ist aber nicht möglich, diesen Effekt im gesamten sichtbaren Spektralbereich in ungefähr gleicher Stärke zu realisieren.

Für den normalen Polarisierungseffekt hingegen können Gitter gefunden werden, die im gesamten sichtbaren Bereich einen merklichen Polarisierungseffekt aufweisen (siehe Abschnitt 5.4.4). Für solche Gitter sind auch allgemeine Aussagen über die beste Wahl der Gitterparameter möglich. Da die experimentelle Arbeit überwiegend mit Chrom durchgeführt wurde, sollen im folgenden die Parameter für Chrom-Gitter optimiert werden.

Zu beachten ist zunächst, das nicht gleichzeitig das optimale Polarisationsverhältnis und eine hohe TM-Transmission erreicht werden kann (s. Abschnitt 5.4.1); im vorliegenden Fall soll das bestmögliche  $\mathcal{P}$  realisiert werden, wobei u.U. geringe Transmissionseffizienzen auch für TM-Transmission akzeptiert werden müssen.

Beschränkungen bei der freien Auswahl der Gitterparameter ergeben sich aus drei Gründen:

1. Die Profiltiefe der Gitter darf nicht zu klein sein, da für Metalldicken  $h \lesssim 20$  nm ein schwacher inverser Polarisierungseffekt vorliegt (s. Abb. 18).
2. Die Auflösung der verwendeten Herstellungstechnologie ist begrenzt. Gegenwärtig liegt die erreichbare Minimalperiode im Resist bei  $d_{\min} \approx 100$  nm.
3. Gitterperiode  $d$  und Profiltiefe  $h$  sind nicht unabhängig voneinander, da es für das erreichbare Aspektverhältnis ebenfalls eine technologisch bedingte Grenze gibt.



Die zweite genannte Beschränkung betrifft die minimal realisierbare Gitterperiode. Die Kombination aus Bedingung 1 und 3 führt jedoch ebenfalls auf eine Beschränkung für  $d$ . Aus den Gleichungen 1 und 2 ergibt sich nämlich der Zusammenhang

$$d = \frac{h}{f\mathcal{A}}, \quad (67)$$

wobei  $f < 0.5$  angenommen wurde, da das beste Polarisationsverhältnis für die hier relevanten Gitterparameter im Bereich  $f < 0.5$  erreicht wird (s. Abb. 13). Speziell kann man somit die minimale Gitterperiode  $d_{\min}$  abschätzen, die im Metall realisierbar ist:

$$d_{\min} = \frac{h_{\min}}{f\mathcal{A}_{\max}}. \quad (68)$$

Setzt man für eine ungefähre Abschätzung  $f = 0.4$ ,  $\mathcal{A}_{\max} = 0.5$  und  $h_{\min} = 30$  nm, so ergibt sich  $d_{\min} = 150$  nm. Das ist größer als die Minimalperiode aufgrund der Auflösungsbeschränkung des Lithografie- und Entwicklungsprozesses (Beschränkung 2). Wird  $h$  noch erhöht bzw.  $f$  noch verkleinert, wird der Unterschied noch deutlicher.

Hieraus resultiert als sehr wesentliche Erkenntnis, daß nicht die lithografische Auflösungsgrenze, sondern die Kombination aus notwendiger Metallschichtdicke und begrenztem Aspektverhältnis derjenige Faktor ist, der die Polarisationswirkung der vorliegenden Gitter begrenzt. Die zweite o.g. Beschränkung ist also für die Optimierung der Gitterparameter nicht relevant. Es verbleibt die Aufgabe, das Polarisationsverhalten der Gitter zu optimieren unter der Annahme eines konstanten, maximal erreichbaren Aspektverhältnisses. Wie bereits in Abbildung 16 gezeigt, führt eine solche Annahme tatsächlich zu einem optimalen Gitterdesign.

Eine entsprechende Optimierung für die hier relevanten Parameter (Metallstreifengitter in Chrom auf Glas bei  $\lambda = 550$  nm) und vier verschiedene vorgegebene Aspektverhältnisse zeigt Abbildung 20 (durchgezogene Linien). Im Unterschied zu Abbildung 16, wo das Tastverhältnis auf  $f = 0.35$  fixiert war, wird jedoch nun auch das Tastverhältnis als freier Parameter angesehen. Jeder Datenpunkt in Abbildung 20 ist also seinerseits Ergebnis einer Optimierung, bei der  $\mathcal{A}$  (Kurven-Parameter) und  $h$  (Abszisse) vorgegeben wurden; aus dem Bereich der dann noch möglichen  $d$  bzw.  $f$  wurde der Parametersatz ausgewählt, der zum bestmöglichen Polarisationsverhältnis  $\mathcal{P}_{\max}$  führt. Abbildung 20 zeigt also eine Optimierung unter wirklich *allen* realisierbaren Parameterkombinationen für ein vorgegebenes Aspektverhältnis  $\mathcal{A}$ . Es ist erkennbar, daß es für jedes  $\mathcal{A}$  ein Maximum für  $\mathcal{P}_{\max}$  gibt, und daß dessen Wert und die zugehörige Profiltiefe stark von  $\mathcal{A}$  abhängen. Auch die zugehörige Periode ändert sich. Um dies zu verdeutlichen, wurden Punkte gleicher Periode auf den Kurven für konstante  $\mathcal{A}$  in Abb. 20 mit gepunkteten Linien verbunden.

Von besonderem Interesse in Abbildung 20 ist die Kurve b für  $\mathcal{A} = 0.5$ , denn dieses Aspektverhältnis entspricht ungefähr dem Limit der hier verwendeten Herstellungstechnologie (s. Gleichung 15). Aus dieser Kurve lassen sich zwei unterschiedliche Arbeitsbereiche ableiten, um die

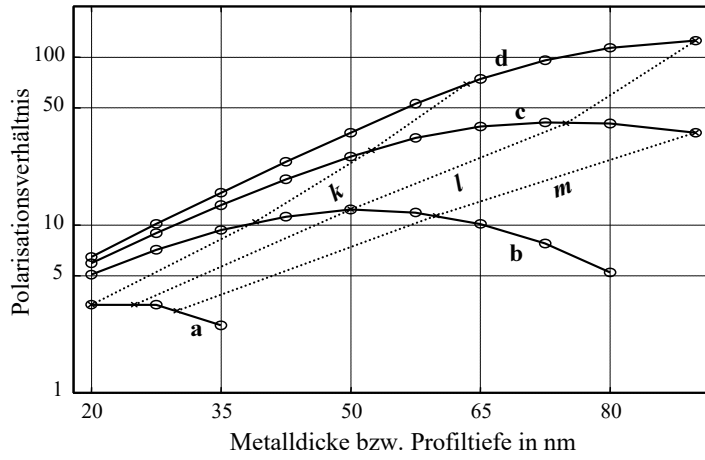


Abbildung 20: Durchgezogene Linien: bestmöglich erreichbares Polarisationsverhältnis  $\mathcal{P}_{\max}$  (rigoros berechnet) für Metallstreifengitter in Chrom bei  $\lambda = 550$  nm für ein vorgegebenes Aspektverhältnis von (a)  $\mathcal{A} = 0.25$ , (b)  $\mathcal{A} = 0.5$ , (c)  $\mathcal{A} = 0.75$  und (d)  $\mathcal{A} = 1.0$ ; gepunktete Linien: Verbindung von Punkten gleicher Periode auf den o.g. Kurven, und zwar (k)  $d = 160$  nm, (l)  $d = 200$  nm und (m)  $d = 240$  nm

eingangs formulierten Ziele (Realisieren eines hohen Polarisationsverhältnisses, systematische Untersuchung des Einflusses verschiedener Parameter) zu erreichen.

Für eine Profiltiefe von  $h = 50$  nm kann das bestmögliche Polarisationsverhältnis von  $\mathcal{P}_{\max} \approx 12$  erreicht werden (die resultierenden Parameter sind dabei  $d = 200$  nm und  $f = 0.5$ ). Da die Periode von  $d = 200$  nm gleichzeitig die Herstellungsgrenze bei dieser Profiltiefe darstellt, ist jedoch eine Variation von  $f$  nicht möglich; diese kann erst für  $d \gtrsim 240$  nm erfolgen. Da andererseits für Perioden  $d \geq 366$  nm bereits die  $\pm 1$ . Beugungsordnung in Reflektion propagiert, ergibt sich für die systematische Untersuchung nur ein relativ kleiner Variationsbereich  $240 \text{ nm} \lesssim d \lesssim 360 \text{ nm}$ , und dementsprechend ist auch der Variationsbereich für  $f$  eingeschränkt.

Eine systematische Untersuchung des Einflusses von  $f$  und  $d$  wird erleichtert, wenn die Profiltiefe  $h$  reduziert wird. Für beispielsweise  $h = 35$  nm wird zwar nur noch  $\mathcal{P}_{\max} \approx 9$  (bei  $\mathcal{A} = 0.5$  und  $\lambda = 550$  nm) erreichbar, aber der Bereich realisierbarer Perioden mit gleichzeitig möglicher Variation von  $f$  ist dann deutlich erweitert:  $170 \text{ nm} \lesssim d \lesssim 360 \text{ nm}$ . Die Schichtdicke von  $h = 35$  nm wurde daher für die systematische experimentelle Arbeit ausgewählt.

Der damit maximal erreichbare Polarisierungseffekt von  $\mathcal{P}_{\max} \approx 9$  ist relativ gering. Um einen stärkeren Polarisierungseffekt zu realisieren, verbleiben folgende Möglichkeiten:

- Veränderung der Herstellungstechnologie (größeres herstellbares Aspektverhältnis);
- Ausnutzen des inversen Polarisierungseffekts statt des normalen Effekts; oder
- Verwenden einer nicht-binären Gittergeometrie.

Die letzten beiden Schlußfolgerungen wurden (neben der systematischen Untersuchung von Chrom-Gittern mit den erwähnten Parametern) experimentell umgesetzt.

## 6 Experimentelle Resultate

### 6.1 Metallstreifengitter in Chrom

#### 6.1.1 Normaler Polarisierungseffekt

##### 6.1.1.1 Einfluß des Tastverhältnisses

Bei der durchgeführten experimentellen Untersuchung der Gittereigenschaften wurde sowohl das Tastverhältnis  $f$  als auch die Gitterperiode  $d$  variiert. Für die gewählte Schichtdicke des Metalles von  $h = 35$  nm ergibt sich rechnerisch aus Gleichung 68 (mit  $\mathcal{A}_{\max} = 0.5$  nach Gleichung 15 und  $f = 0.5$ ) eine minimal erzeugbare Gitterperiode  $d_{\min} = 140$  nm. Experimentell konnte  $d_{\min} = 160$  nm erreicht werden.

Der Bereich der realisierbaren Tastverhältnisse ist bei dieser Periode sehr klein, vergrößert sich aber mit wachsender Periode. Er wird dabei nicht rechnerisch vorgegeben, sondern ergibt sich im Herstellungsprozeß (Grenze in Richtung  $f \rightarrow 0$ : Resistgräben nicht durchentwickelt bzw. Metallschicht in den Gräben nicht vollständig durchgeätzt; Grenze in Richtung  $f \rightarrow 1$ : Resiststege werden instabil und im Entwicklungsprozeß abgelöst, nach dem Ätzen entsteht eine große chromfreie Fläche ohne Metallstreifen). Die Bestimmung des Tastverhältnisses erfolgte durch Messung der Steg- und Grabenbreiten der metallischen Gitterstruktur mit dem REM. Die Bestimmung der Transmissionen erfolgte wie in Abschnitt 3.2.3 beschrieben.

Insgesamt wurden sechs verschiedene Gitterperioden realisiert und dabei jeweils das Tastverhältnis  $f$  variiert, soweit dies experimentell möglich war. Der Einfluß von  $f$  soll am Beispiel der Periode  $d = 220$  nm dargestellt werden. Abbildung 21a zeigt die gemessenen Transmissionen für TE- und TM-Polarisation als Meßpunkte, Abb. 21b das resultierende Polarisationsverhältnis. Die rigoros berechneten Resultate wurden als Kurve eingezeichnet.

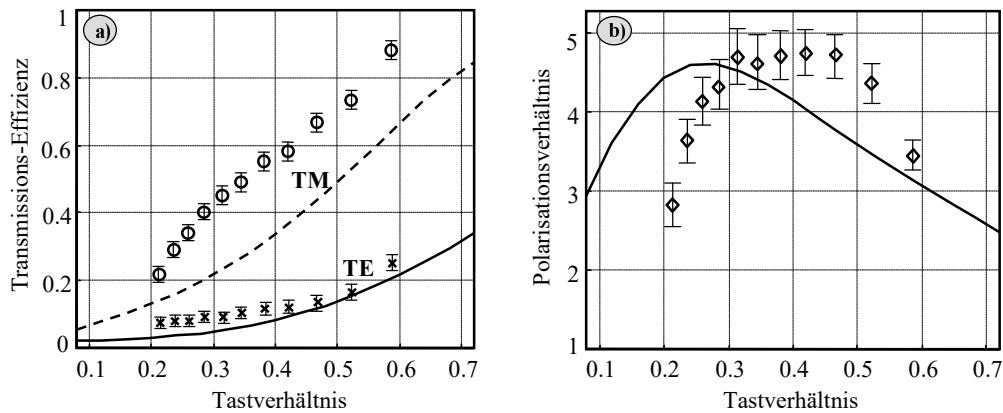


Abbildung 21: Transmissionseffizienzen (a) und resultierendes Polarisationsverhältnis (b) für Chrom-Metallstreifengitter mit  $h = 35$  nm und  $d = 220$  nm bei Weißlicht-Beleuchtung (Marker: Meßwerte; Linien: rigoros berechnete Resultate)

Qualitativ ergibt sich eine Übereinstimmung des gemessenen und rigoros berechneten Verhaltens, die Form der Kurven stimmt weitgehend mit der relativen Lage der Meßpunkte zueinander überein. Ebenfalls eine gute Übereinstimmung existiert für das maximal erreichte Polarisationsverhältnis (berechnet  $\mathcal{P}_{\max} = 4.7$ , experimentell  $\mathcal{P}_{\max} = 4.8$ ). Beim Vergleich der Lage der experimentellen bzw. berechneten Ergebnisse ergibt sich jedoch scheinbar eine deutliche Verschiebung bezüglich des Tastverhältnisses. Diese Verschiebung ist aber beim Polarisationsverhältnis genau in die entgegengesetzte Richtung als bei den Effizienzen, so daß es sich nur um einen scheinbaren Effekt handelt und nicht einfach durch einen Fehler in der Tastverhältnis-Bestimmung erklärbar wäre. Die wirkliche Abweichung besteht darin, daß die gemessenen Transmissionen generell deutlich über den berechneten Werten liegen, in TM-Polarisation bis zu 25%. Dies gilt auch für die Transmission der geschlossenen, unstrukturierten Chromschicht, für die experimentell ein Wert von 7% ermittelt wurde, während die rigorose Rechnung eine Schichttransmission von 1.5% erwarten läßt. Aus der unterschiedlichen Größe der Abweichung in TE- und TM-Transmission resultiert die scheinbare Verschiebung der Kurve des Polarisationsverhältnisses.

#### 6.1.1.2 Diskussion möglicher Ursachen der Abweichungen

Prinzipiell ergeben sich im experimentellen Bereich vier mögliche Ursachen für diese höheren Transmissionen:

- Schichtdicke der Metallschicht ist dünner als angenommen;
- Brechzahl der Metallschicht weicht vom angenommenen Wert ab;
- Verfälschung der gemessenen Transmissionen durch Streulicht;
- Abweichung des hergestellten Gitters vom angenommenen ideal binären Profil.

Die Überprüfung der Metallschichtdicke mit verschiedenen Meßverfahren (Tastschnittgerät, optisches Oberflächenprofilometer) ergab Werte im Bereich  $h = 28 \dots 40$  nm. Die gemessene Transmission der Schicht von 7% ergibt sich theoretisch bei einer Schichtdicke von nur 19 nm, so daß ein Schichtdickenfehler als alleinige Ursache ausscheidet.

Eine Abweichung der Chrom-Brechzahl existiert in jedem Fall, da die Chrom-Schicht sehr dünn ist, in der rigorosen Rechnung aber die massiv-metallische Brechzahl benutzt wird. Eine ellipsometrische Messung einer vergleichbaren, 50 nm dicken Chromschicht ergab bei  $\lambda = 633$  nm den Wert  $\hat{n} = 2.58 + 4.33i$  [97], während in der rigorosen Rechnung  $\hat{n} = 3.54 + 4.35i$  benutzt wird. Eine Berechnung mit der abweichenden Brechzahl ergibt aber nur eine leichte Erhöhung der Transmissionen der unstrukturierten Metallschicht um  $\lesssim 1\%$ . Allerdings kann nicht ausgeschlossen werden, daß die Brechzahlabweichung bei anderen Wellenlängen bzw. für dünnere Schichten eventuell stärker ist. Für Metallstreifengitter kann die Abweichung der Transmission bei veränderter Brechzahl deutlich stärker sein als für die unstrukturierte Schicht, dies hängt aber stark von den konkreten Gitterparametern ab.

Eine Meßwertverfälschung durch Streulicht existiert ebenfalls in jedem Fall, da das Mikroskop eine Reihe optischer Grenzflächen aufweist, die sowohl unerwünschte Reflexionen als auch Streulicht verursachen. Die Reflexionen können direkt als „Geisterbilder“ im Mikroskop beobachtet werden, somit ist aber auch die Verfälschung der Meßwerte durch diese Reflexe verhinderbar. Das Auftreten von Streulicht läßt sich dagegen nicht beeinflussen, da der Strahlengang innerhalb des Mikroskopes unzugänglich ist. Aufgrund von Versuchen kann abgeschätzt werden, daß die Verfälschung der Transmission durch Streulicht im Bereich  $\lesssim 5\%$  liegt.

Die bisher genannten Fehler können in Summe die Abweichung in der Schichttransmission von ca. 5.5% sowie prinzipiell auch die abweichende TE-Transmission der Gitter verursachen. Die wesentlich größeren Unterschiede in den TM-Transmissionen der Gitter sind allein durch die bisherigen Gründe nicht erklärbar. Hier ist als wesentliche Ursache die Abweichung vom binären Gitterprofil zu vermuten. Diese Abweichung besteht zum einen im Querschnitt der Metallstreifen, der im Realfall niemals rechteckig, sondern meist näherungsweise trapezförmig ist; zum anderen in der Zusammensetzung der Gitterstege. Die Annahme von zwei sich abwechselnden Bereichen unterschiedlicher Brechzahl im Gitterbereich ist nur eine grobe Näherung, da sich durch den bereits erläuterten Redepositionseffekt Mischschichten ausbilden, und durch den Ionenstrahlätzprozeß auch die Materialeigenschaften der Metallschicht bis in eine Tiefe von mehreren 10 nm verändert werden können [38].

Die rigorose Modellierung beider genannter Aspekte erscheint prinzipiell möglich. Wird *nur* das trapezoidale Metallstreifen-Profil berücksichtigt, ergeben sich aber keine wesentlichen Veränderungen des optischen Verhaltens, solange realistisch scheinende Kantenwinkel des Metallstreifens (Abweichung von der Senkrechten bis ca.  $45^\circ$ ) angenommen werden [98]. Erforderlich ist also auch die Berücksichtigung der veränderten Materialeigenschaften in der rigorosen Rechnung. Da hierfür jedoch gegenwärtig keine konkreten Daten vorliegen, war die Einbeziehung dieses Effekts in die Modellierung bisher nicht möglich.

Generell erscheint es aber plausibel anzunehmen, daß die Abweichungen der TM-Transmission wesentlich durch das nicht-binäre Gitterprofil verursacht werden, denn in vielen Fällen reagiert die TM-Polarisation wesentlich empfindlicher auf Fehler im Gitterprofil als die TE-Polarisation. Da die gemessenen Abweichungen in der TE-Transmission deutlich kleiner als in TM-Transmission sind, befinden sich die gezeigten Resultate zumindest in qualitativer Übereinstimmung mit dieser Erfahrungstatsache.

Aus den experimentellen Resultaten ergibt sich, daß das optimale Polarisationsverhältnis bei einem Tastverhältnis  $f_{\text{opt}} \approx 0.4$  erreicht wird. Dies liegt näher an  $f = 0.5$  als entsprechend der rigorosen Rechnung zu erwarten ( $f_{\text{opt}} = 0.27$ ). Hierdurch wird die Herstellung gut polarisierender Gitter etwas vereinfacht. Darüber hinaus weisen die gut polarisierenden Gitter auch hohe gemessene Transmissionen bis zu  $\eta_{\text{TM}} \approx 60\%$  auf, während die rigorose Rechnung beim bestmöglich

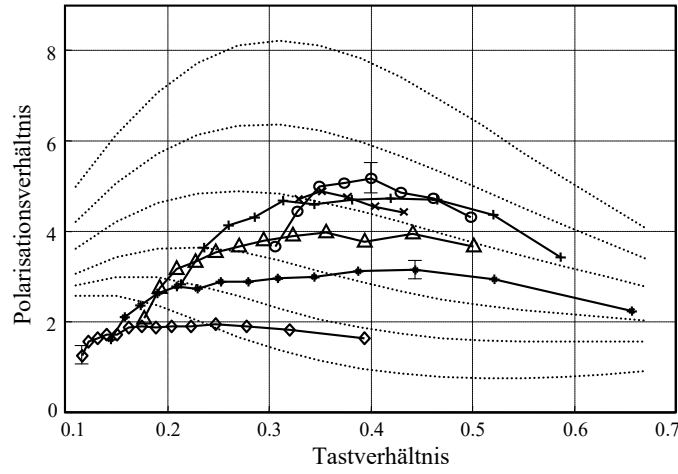


Abbildung 22: durchgehende Linien und Marker: Gemessene Polarisationsverhältnisse für Metallstreifengitter in 35 nm Chrom bei Weißlichtbeleuchtung für  $d = 160$  nm ( $\times$ ),  $d = 190$  nm ( $\circ$ ),  $d = 220$  nm ( $+$ ),  $d = 260$  nm ( $\Delta$ ),  $d = 300$  nm ( $*$ ) bzw.  $d = 400$  nm ( $\diamond$ ); gepunktete Linien: Ergebnisse der rigorosen Rechnung für dieselben Perioden (von oben nach unten)

polarisierenden Gitter nur  $\eta_{\text{TM}} = 18\%$  ergab. Die experimentell ermittelten Gittereigenschaften sind damit günstiger (bzw. anwendungsfreundlicher) als erwartet.

### 6.1.1.3 Variation der Gitterperiode

Die am Beispiel der Gitterperiode  $d = 220$  nm gezeigten detaillierten Aussagen über die Transmissionseffizienzen gelten weitgehend analog für alle Metallstreifengitter. Das resultierende Polarisationsverhältnis für den gesamten Bereich der realisierten Gitterperioden zeigt Abb. 22. Zum Vergleich sind die Ergebnisse der rigorosen Modellierung ebenfalls dargestellt (gepunktete Linien). Auch hier zeigt sich eine gute Übereinstimmung im prinzipiellen Verlauf der Kurven, gleichzeitig für alle Perioden die Abweichung in der Lage des optimalen Tastverhältnisses.

Darüber hinaus ergibt sich jedoch ein unterschiedliches Verhalten in der Frage des maximal erreichbaren Polarisationsverhältnisses. Um dies zu verdeutlichen, wurden die maximal erreichten experimentellen Werte sowie die rigoros berechneten Bestwerte noch einmal gesondert dargestellt (Abb. 23). Die durchgezogene Linie zeigt die Ergebnisse der rigorosen Modellierung; für Perioden  $d < 350$  nm wird  $\mathcal{P}_{\text{max}}$  um so größer, je kleiner die Periode ist. Der leichte Anstieg der rigoros berechneten  $\mathcal{P}_{\text{max}}$  bei Vergrößerung der Periode von 350 nm auf 400 nm liegt daran, daß im Fall der zugrundeliegenden Weißlichtbeleuchtung für einen zunehmenden Anteil des Wellenlängenspektrums der kritische Punkt  $\mathcal{N}_R = 1/n_{\text{Substrat}}$  überschritten wird, d.h. für die kurzen Wellenlängen propagiert die  $\pm 1$ . Beugungsordnung, was das Polarisationsverhalten modifiziert.

Die experimentell ermittelten Werte von  $\mathcal{P}_{\text{max}}$  (gestrichelte Kurve in Abb. 23) folgen der rigoros berechneten Kurve im Bereich  $400 \text{ nm} \gtrsim d \gtrsim 220 \text{ nm}$  recht gut. Obwohl für alle diese Perioden eine Abweichung im optimalen Tastverhältnis auftritt, ergibt sich eine gute Überein-

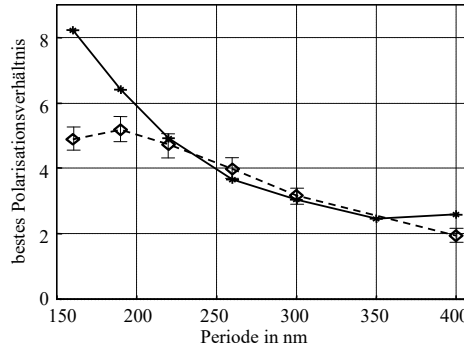


Abbildung 23: bestes Polarisationsverhältnis  $\mathcal{P}_{\max}$  für Metallstreifengitter in 35 nm Chrom bei Weißlichtbeleuchtung (gestrichelt: Meßwerte, durchgezogen: rigoros berechnet)

stimmung in der Stärke des Polarisierungseffektes. Die leichte Abweichung bei  $d = 400$  nm ist dabei ohne größeren Belang, da das optische Verhalten in der Umgebung des Rayleigh-Punktes  $\mathcal{N}_R$  sehr empfindlich durch kleine Abweichungen der Gittergeometrie beeinflusst wird.

Dagegen ergibt sich für Perioden  $d < 220$  nm ein zunehmender Unterschied in  $\mathcal{P}_{\max}$ . Der theoretischen Steigerung des Polarisierungseffektes steht eine Stagnation bzw. sogar ein Abfallen im Experiment gegenüber. Die Ursache dieses Abfalles liegt vermutlich in der zunehmenden Annäherung der realisierten Gitter an die Grenze der Herstellbarkeit. Im Kapitel 5 wurde gezeigt, daß die Polarisationswirkung der Metallstreifengitter sehr stark mit der Brechzahl verknüpft ist, d.h. die Leitfähigkeit des Metalls spielt eine wesentliche Rolle. Es wurde aber gleichfalls bereits erwähnt, daß an den Seitenkanten der Gitterstege beim Ätzprozeß immer eine mehr oder weniger starke Mischschicht gebildet wird. Der Steg des Metallstreifengitters besteht also nicht vollständig aus metallischem Material, und der (relative) Anteil der Mischschicht wird mit (absolut) kleiner werdender Stegbreite bei Verkleinerung der Periode immer größer, der verbleibende tatsächlich metallische Bereich dagegen immer kleiner. Da die Brechzahl bzw. Leitfähigkeit der Mischschicht vermutlich stark von den Werten des Metalls abweicht, kann von einer Abschwächung des Polarisierungseffektes durch diese Mischschicht ausgegangen werden. Auch wenn die quantitative Modellierung dieses Effektes aufgrund der bereits geschilderten Schwierigkeiten (Brechzahl der Mischschichten gänzlich unbekannt, Anteil der Mischschicht am Gesamtquerschnitt des Steges ebenfalls unbekannt) nicht möglich war, erscheint es im Ergebnis dieser Betrachtung naheliegend, daß die Reduzierung der Gitterperiode nur bis zu einem gewissen Punkt eine Verbesserung des Polarisierungseffektes bewirkt, und eine weitere Verkleinerung der Periode darüber hinaus einen kontraproduktiven Effekt haben muß. Es ergibt sich somit eine qualitative Übereinstimmung zum experimentell beobachteten Verhalten.

Als allgemeine Schlußfolgerung kann abgeleitet werden, daß das rechnerisch (d.h. beispielsweise für ein vorgegebenes maximal erreichbares Aspektverhältnis) optimierte Gitterdesign nicht die experimentell beste Parameterkombination darstellt. Um einen guten Polarisierungseffekt zu

realisieren, ist es stattdessen erforderlich, nicht zu nahe an die technologisch bedingte Grenze der Herstellbarkeit zu gehen. Für eine Chromdicke  $h = 35$  nm ist die minimal herstellbare Gitterperiode rechnerisch  $d = 140$  nm; die realisierte Minimalperiode betrug  $d = 160$  nm; der stärkste Polarisierungseffekt wurde experimentell bei  $d = 190$  nm erreicht; und ein Übereinstimmen des maximalen Polarisierungseffekts in Theorie und Experiment ergab sich für  $d \geq 220$  nm.

### 6.1.2 Wechsel zwischen normalem und inversem Polarisierungseffekt

Bei der Analyse des Polarisationsverhaltens von Metallstreifengittern wurde gezeigt, daß in der Umgebung des Rayleigh-Punktes  $\mathcal{N}_R = 1/n_{\text{Substrat}}$  ein Wechsel zwischen normalem und inversem Polarisierungseffekt stattfinden kann (s. Abschnitt 5.4.6). Dieser Effekt wurde auch experimentell an Metallstreifengittern in Chrom untersucht.

Für die verwendeten Parameter ( $\lambda = 625$  nm, Profiltiefe  $h = 30$  nm, senkrechter Lichteinfall von der Substratseite, Substrat-Material  $\text{SiO}_2$ ) liegt der Rayleigh-Punkt bei der Periode  $d = 429$  nm. Um die Entwicklung des optischen Verhaltens in der Umgebung dieses Punktes untersuchen zu können, wurden sieben verschiedene Gitterperioden im Bereich  $d = 370$  nm . . . 490 nm realisiert. Die rigorose Modellierung zeigt, daß der Wechsel zum inversen Polarisierungseffekt noch vom Tastverhältnis  $f$  beeinflusst wird. Für  $f < 0.27$  ergibt sich gar kein inverser Effekt, sondern nur ein Minimum in  $\mathcal{P}$ . Für Werte  $f \approx 0.5$  ergibt sich dagegen ein größerer Bereich bzgl.  $d$ , in dem der inverse Polarisierungseffekt resultiert. Zum experimentellen Nachweis wurde daher neben der Variation der Gitterperiode auch eine Variation des Tastverhältnisses vorgenommen. Die Vermessung der hergestellten Gitter ergab für  $f$  Werte von  $0.34 \pm 0.03$  sowie  $0.47 \pm 0.03$ .

Da das Umschlagen von normalem zu inversem Polarisierungseffekt offensichtlich sehr empfindlich von den Gitterparametern abhängt, mußte große Sorgfalt auf die möglichst gute Realisierung des angestrebten binären Gitterprofils gelegt werden. Daher wurde die bereits in Abschnitt 3.1.5 beschriebene Methode benutzt, zwischen der zu strukturierenden Metallschicht und der als Ätzmaske dienenden Resistschicht eine 10 nm dünne Aluminiumschicht anzuordnen, um an den Profilflanken redeponierte Mischschichten weitgehend zu entfernen. Während bei einer Reihe von Experimenten *ohne* diese spezielle Technik der Wechsel des Polarisierungseffektes nicht beobachtet werden konnte (in der Umgebung des Rayleigh-Punktes ergab sich nur ein Absinken von  $\mathcal{P}$  bis nahe an Eins, also eine deutliche Wood-Anomalie, aber nicht  $\mathcal{P} < 1$ ), war die experimentelle Bestätigung des Wechsels *mit* der Aluminium-Zwischenschicht möglich.

Dies verdeutlicht einerseits die mit der verwendeten Herstellungstechnologie erreichbare Gitterqualität. Andererseits wird sichtbar, daß der Umschlag zum inversen Polarisierungseffekt aufgrund der empfindlichen Beeinflussung durch verschiedene Gitter- oder Beleuchtungsparameter potentiell für die hochgenaue Messungen solcher Parameter geeignet ist.

Die experimentellen Resultate zeigt Abbildung 24 (gepunktete Linien und Marker). Da die



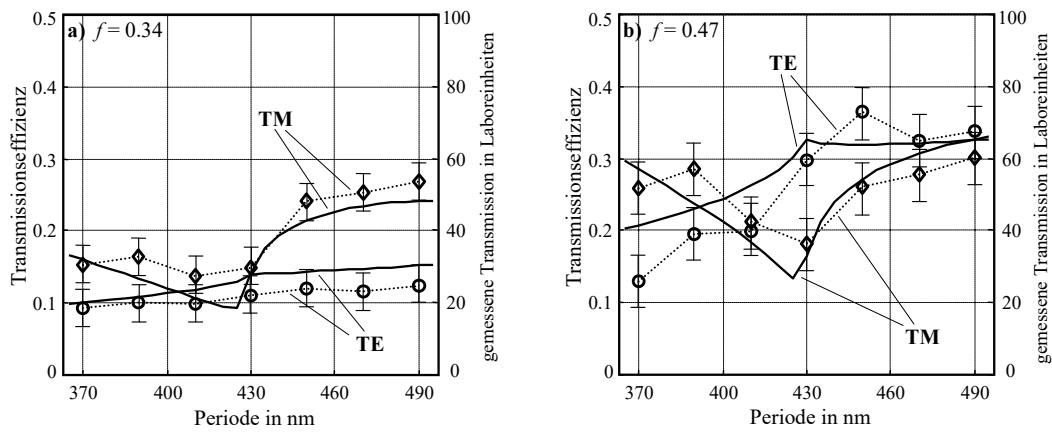


Abbildung 24: a) rigoros berechnete Transmissionseffizienzen (durchgezogene Linien und linke Ordinate) sowie gemessene relative Transmissionen (gepunktete Linien mit Markern und rechte Ordinate) für Metallstreifengitter in Chrom auf Quarz mit  $f = 0.34$ , beleuchtet mit  $\lambda = 625$  nm; b) analog für  $f = 0.47$

Transmissionseffizienzen der verschiedenen Gitter nicht als Absolutwerte bestimmt werden konnten, sondern nur die relative Transmissionsänderung der Gitter untereinander, wurden die Meßwerte in Abb. 24 so skaliert, daß sich die bestmögliche Übereinstimmung zu den rigoros berechneten Kurven (durchgezogene Linien) ergab.

Für das Tastverhältnis  $f = 0.34$  (Abb. 24a) ergibt sich generell ein dominierender normaler Polarisierungseffekt mit  $\eta_{\text{TM}} > \eta_{\text{TE}}$ . Gemäß rigoroser Rechnung tritt nur in einem schmalen Bereich  $405 \text{ nm} < d < 430 \text{ nm}$  ein inverser Effekt auf. Ein solches Gitter mit  $\eta_{\text{TM}} < \eta_{\text{TE}}$  konnte nicht realisiert werden, es ergab sich aber experimentell immerhin eine deutliche Annäherung von  $\eta_{\text{TM}}$  an  $\eta_{\text{TE}}$  in diesem Bereich. Für das Tastverhältnis  $f = 0.47$  ergibt die rigorose Rechnung einen deutlich größeren Bereich  $392 \text{ nm} < d < 485 \text{ nm}$ , in dem der inverse Polarisierungseffekt auftritt. In diesem Fall wurde der inverse Effekt auch experimentell nachgewiesen, und zwar für die Gitterperioden 430 nm, 450 nm, 470 nm und 490 nm.

Vergleicht man den generellen Verlauf der berechneten Kurven mit der Lage der Meßwerte, so ergibt sich eine gute Übereinstimmung. Die Resultate zeigen also eindeutig den Umschlag vom normalen zum inversen Polarisierungseffekt in der Umgebung des Rayleigh-Punktes sowie die erwartete Beeinflussung dieses Effekts durch das Tastverhältnis.

Die in Abbildung 24 ebenfalls deutlich sichtbaren Abweichungen einzelner Meßwerte vom erwarteten Verlauf sind unter anderem darauf zurückzuführen, daß die Transmissionseffizienz der Gitter nicht völlig homogen über die realisierte Gitterfläche hinweg war. Die Ursache hierfür (die bei Durchführung der Experimente noch nicht vollständig geklärt war) liegt im Einfluß des Adressinkrementes der Elektronenstrahlbelichtungsanlage LION LV1 auf die Gitterqualität. Darauf wird in Abschnitt 7.3 gesondert eingegangen.

## 6.2 Inverser Polarisisationseffekt an Metallstreifengittern in Silber

### 6.2.1 Übersicht

Die allgemeine Limitierung des stärksten erreichbaren Polarisisationseffektes durch das maximal realisierbare Aspektverhältnis gilt nur für den normalen Polarisisationseffekt. Durch Ausnutzen des inversen Effekts kann potentiell ein besseres Polarisationsverhalten bei gleichen Strukturanforderungen realisiert werden. Hierzu ist ein Metall mit möglichst ausgeprägtem inversen Effekt erforderlich. Entsprechend Abschnitt 5.4.5 kommen prinzipiell Kupfer oder Silber in Frage (evtl. auch Gold), die Experimente wurden mit Silber durchgeführt. Wegen der in Abschnitt 3.1.5 erläuterten Probleme beim Ionenstrahlätzen von Silber wurde zur Herstellung der Gitter das „Lift-off“-Verfahren benutzt.

Bei einer Metalldicke  $h = 30\text{ nm}$  und der Wellenlänge  $\lambda = 625\text{ nm}$  ergibt die rigorose Berechnung beträchtliche Polarisisationseffekte<sup>11</sup> bis zu  $1/\mathcal{P} \approx 50$  für Perioden im Bereich  $d = 350\text{ nm} \dots 400\text{ nm}$  und Tastverhältnisse  $f = 0.3 \dots 0.5$ . Es wurden Gitter mit den Perioden  $d = 351\text{ nm}$ ,  $d = 371\text{ nm}$  und  $d = 391\text{ nm}$  hergestellt, durch verschiedene Belichtungsdosen wurde zusätzlich das Tastverhältnis variiert. Die genannten Perioden liegen knapp unterhalb der „Zero-Order“-Grenze (die für  $n_{\text{Substrat}} = 1.5$  bei  $d = 417\text{ nm}$  liegt), so daß in der Modellierung die Divergenz des einfallenden Lichtes berücksichtigt werden muß (vgl. Abschnitt 6.2.3).

Bei der optischen Untersuchung der hergestellten Gitter wurde neben den Gittern selbst auch die Transmission der homogenen Silberschicht gemessen. Bei bekannter Brechzahl kann hieraus die Schichtdicke ermittelt werden. Diese Messung wurde bei  $\lambda = 625\text{ nm}$  und  $\lambda = 500\text{ nm}$  vorgenommen:

$$T_{\text{Schicht}} = (14.2 \pm 1)\% \text{ bei } \lambda = 500\text{ nm, mit } \hat{n}_{\text{Ag}} = 0.24 + 3.13i \text{ folgt } h = (30.7 \pm 1.0)\text{ nm};$$

$$T_{\text{Schicht}} = (9.8 \pm 1)\% \text{ bei } \lambda = 625\text{ nm, mit } \hat{n}_{\text{Ag}} = 0.27 + 4.22i \text{ folgt } h = (28.5 \pm 1.3)\text{ nm}.$$

Daraus ergibt sich eine recht gute Übereinstimmung mit der angenommenen Schichtdicke von  $h = 30\text{ nm}$ , obwohl die Brechzahl der dünnen Silberschicht sicherlich nicht völlig mit dem Wert für massives Silber übereinstimmt, der der Rechnung zugrundegelegt wurde.

### 6.2.2 Bestimmung der Tastverhältnisse

Die rasterelektronenmikroskopische Messung der realisierten Tastverhältnisse wurde zweimal in unterschiedlichen Präparationszuständen der Gitterstrukturen vorgenommen, um eine große Sicherheit der Meßwerte zu erhalten sowie eventuelle systematische Einflüsse der Präparation auf die Meßwerte festzustellen.

---

<sup>11</sup>Gemäß Definition (Gleichung 4) ist für den inversen Polarisisationseffekt  $\mathcal{P} < 1$ . Um die Ergebnisse anschaulicher darzustellen, wird im vorliegenden Abschnitt das reziproke Polarisationsverhältnis  $1/\mathcal{P}$  angegeben.

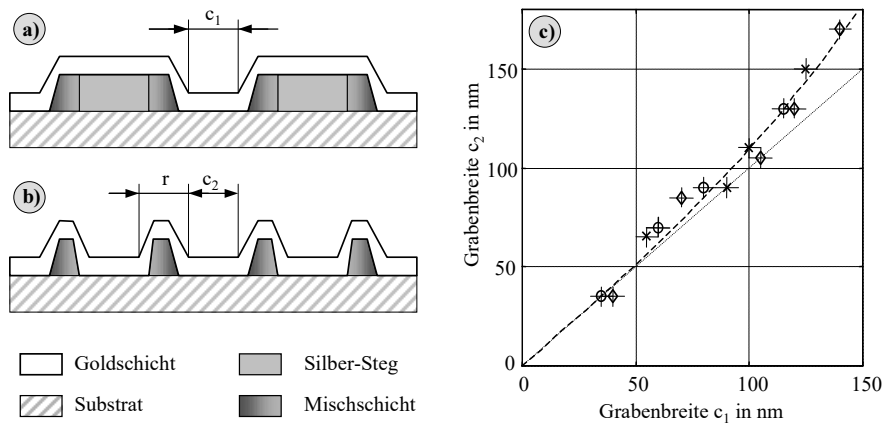


Abbildung 25: a) und b): zwei verschiedene Konfigurationen bei der Messung der Grabenbreite  $c$  von Silber-Metallstreifengittern; c) Vergleich der Meßwerte aus a) und b) für die Gitterperioden  $d = 351 \text{ nm}$  ( $\circ$ ),  $d = 371 \text{ nm}$  ( $\times$ ), bzw.  $d = 391 \text{ nm}$  ( $\diamond$ ) (Marker jeweils mit Fehlerbalken) sowie resultierender näherungsweiser Zusammenhang (gestrichelte Linie)

Die erste Meßreihe erfolgte an den Metallstreifengittern, wie sie im Ergebnis des „Lift-off“-Prozesses entstanden waren. Da die Gitter sich isoliert auf dem dielektrischen Glassubstrat befanden, mußte die gesamte Probe zur Vermeidung von Aufladungen mit einer ca. 20 nm dicken Gold-Schicht überschichtet werden. Die entstehende Konfiguration im Gitterbereich zeigt Abbildung 25a. Als Grenze zwischen Gittersteg und -graben wurde der (im elektronenmikroskopischen Bild deutlich sichtbare) Helligkeitsunterschied zwischen Stegkante und Grabenbereich angenommen, so daß der Wert der Grabenbreite  $c_1$  wie in Abb. 25a bestimmt wurde.

Eine weitere rasterelektronenmikroskopische Untersuchung wurde nach dem naßchemischen Entfernen des Silbers (und gleichzeitig der überschichteten Gold-Schicht) vom Glassubstrat vorgenommen. Hiefür wurde das Substrat erneut dünn übergoldet. Diese Untersuchung ergab, daß die Stege in ihrem Mittelteil tatsächlich abgelöst waren, daß jedoch im (ehemaligen) Randbereich der Stege deutlich sichtbare Materialreste verblieben waren. Abbildung 25b zeigt schematisch den entsprechenden Querschnitt. Die verbliebenen Reste sind ein starker Hinweis darauf, daß im Randbereich der Stege kein rein metallisches Material vorliegt, sondern eine wesentlich haftere Mischschicht aus Resist und Silber. Anhand der speziellen Probenpräparation konnte die Breite dieser Randzone bestimmt werden, es ergab sich  $r = (40 \pm 20) \text{ nm}$ . Gleichzeitig erlaubten diese Reste eine nochmalige Bestimmung der Grabenbreite (als  $c_2$  bezeichnet).

Den Vergleich zwischen beiden Meßreihen zeigt Abbildung 25c (Meßwerte als Marker sowie gemittelter Zusammenhang als gestrichelte Linie). Für schmale Gittergräben  $c \lesssim 50 \text{ nm}$  ist eine gute Übereinstimmung zwischen den beiden Meßwerten  $c_1$  und  $c_2$  erkennbar. Bei größeren Grabenbreiten  $c \gtrsim 100 \text{ nm}$  ergibt sich aber ein deutlicher Unterschied. Eine vollständige Erklärung hierfür kann aus den wenigen zur Verfügung stehenden Meßdaten nicht abgeleitet werden. Ge-

nerell kommen als mögliche Effekte in Frage:

1. unterschiedliche Formänderung der Mischschicht an den Randbereichen der Silber-Stege im naßchemischen Ätzprozeß in Abhängigkeit von der Grabenbreite (ein solcher Effekt kann weder sicher begründet noch völlig ausgeschlossen werden);
2. unterschiedliche Signalentstehung der bei beiden Untersuchungen benutzten Sekundärelektronen durch die unterschiedlichen Geometrien und Materialanordnungen in den beiden verschiedenen Konfigurationen; dadurch (scheinbare) Verschiebung der als Meßkriterium benutzten Hell-Dunkel-Grenze im elektronenmikroskopischen Bild;
3. unterschiedliches Auftreten von Materialtransportprozessen während der Übersichtung mit Gold analog der sog. "Oberflächendekoration" (vgl. [99] Kapitel 7 und 17-19);
4. leichte Profilierung des dielektrischen Substrats durch Ionenstrahl-Anätzen vor dem „Lift-off“-Prozeß und daraus resultierende Beeinflussung der Signalentstehung der Sekundärelektronen (analog Punkt 2) sowie von Materialtransportprozessen (analog Punkt 3).

Eine abschließende Beurteilung, welche der genannten Effekte sich wie stark auswirken, und welche Meßwerte für die Grabenbreite tatsächlich korrekt sind, ist ohne umfassende systematische Untersuchung nicht möglich. Im vorliegenden Fall werden die Meßwerte  $c_2$  aus Konfiguration b) benutzt, weil sich in dieser Konfiguration eine weitgehend symmetrische Anordnung für die rechte und linke Kante des Metallsteges ergibt, so daß eine Verfälschung durch Effekte gemäß Punkt 2 und 3 der obigen Aufzählung zumindest weniger stark bzw. weniger wahrscheinlich erscheint als für die Konfiguration a) aus Abbildung 25.

Da jedoch die gemessene Randschicht der Breite  $r$  in der rigorosen Rechnung (im Modell des ideal binären Metallstreifengitters) unberücksichtigt bleibt, muß (als einfachste Annahme) ihre Breite jeweils zur Hälfte dem Metallsteg bzw. dem Gittergraben zugerechnet werden. Insgesamt ergibt sich also das im folgenden verwendete Tastverhältnis  $f$  aus den Meßwerten zu

$$f = \frac{c_2 + 2(r/2)}{d} = \frac{c_2 + r}{d} \quad (69)$$

### 6.2.3 Berücksichtigung der Beleuchtungsdivergenz

Die rigorose Berechnung des optischen Verhaltens zeigt für die hier betrachteten Gitter einen signifikanten Einfluß des Einfallswinkels. Die Ursache ist, daß die realisierten Gitterperioden nahe am Rayleigh-Punkt liegen, insbesondere  $d = 391 \text{ nm}$ . Für diese Periode propagiert bei einem Einfallswinkel von  $\theta = 5^\circ$  bereits die -1. Beugungsordnung. Daher ist die Wirkung der Divergenz des einfallenden Lichtes von  $\pm 5^\circ$  bei dieser Periode auch am stärksten. Sie zeigt sich aber auch deutlich für die anderen Perioden.

Eine Berücksichtigung dieses (durch den experimentell benutzten Strahlengang vorgegebenen) Einflusses durch einfache Mittelung von berechneten Resultaten für  $0^\circ$  und  $5^\circ$  Einfallswinkel

(wie beim normalen Polarisierungseffekt in Abschnitt 6.1.1) ist deshalb zu ungenau. Stattdessen wurden die rigorose Modellierung für Einfallswinkel von  $0^\circ$ ,  $1.7^\circ$ ,  $3.4^\circ$  und  $5^\circ$  vorgenommen und anschließend eine gewichtete Mittelung der erhaltenen Effizienzen durchgeführt. Die Wichtungsfaktoren für jeden Winkel wurden dabei entsprechend einem gedachten relativen Flächenanteil in der kreisförmigen Fläche der Aperturblende der Mikroskopbeleuchtung gewählt. Aus den gemittelten Effizienzen wurde dann das resultierende Polarisationsverhältnis bestimmt. Die nach dieser Vorgehensweise gewonnenen Kurven sind in Abbildung 26 dargestellt.

Auch die erläuterte Mittelung für vier diskrete Winkelwerte ist nur eine Näherung, da im Experiment ein kontinuierliches Winkelspektrum vorlag. Die Näherung läßt aber die wesentlichen Veränderungen des optischen Verhaltens gegenüber dem exakt senkrechten Lichteinfall deutlich erkennen. Insbesondere die in Abb. 26a erkennbare Schwankung der TM-Transmission im Bereich  $f < 0.3$  für  $d = 391 \text{ nm}$  (bzw. im Bereich  $f < 0.2$  für  $d = 371 \text{ nm}$ ) ergibt sich nur für von null verschiedene Einfallswinkel; für exakt senkrechten Lichteinfall verlaufen diese Kurven ähnlich konstant wie diejenige für  $d = 351 \text{ nm}$  in Abb. 26a.

#### 6.2.4 Optische Eigenschaften

Die experimentellen Resultate der optischen Untersuchung der hergestellten Gitter bei  $\lambda = 625 \text{ nm}$  als Funktion des Tastverhältnisses (entsprechend Gleichung 69) zeigt Abb. 26 (durchgezogene Linien und Marker). Es ist deutlich erkennbar, daß ein inverser Polarisierungseffekt vorliegt, denn die TE-Transmissionen sind durchgängig höher als die TM-Transmissionen. Der stärkste Polarisierungseffekt wurde für die Periode  $d = 351 \text{ nm}$  mit  $1/\mathcal{P} = 25$  erreicht, die nutzbare TE-Transmission betrug dabei  $\eta_{\text{TE}} = 50\%$ . Dieser Wert liegt — wie die TE-Transmission für alle anderen Gitter auch — deutlich über den rigoros berechneten Werten. Die Polarisierungseffekte für  $d = 371 \text{ nm}$  und  $d = 391 \text{ nm}$  sind etwas schwächer als für  $d = 351 \text{ nm}$ , übertreffen aber deutlich diejenigen der im vorigen Abschnitt (6.1) gezeigten Metallstreifengitter in Chrom.

Die ebenfalls in Abb. 26 dargestellten (und bereits im vorigen Abschnitt erläuterten) rigoros berechneten Resultate zeigen, daß relativ scharfe Minima in  $\eta_{\text{TM}}$  bzw. relativ scharfe Maxima in  $1/\mathcal{P}$  zu erwarten sind. Für die Perioden  $d = 351 \text{ nm}$  und  $d = 371 \text{ nm}$  konnten solche Extrema auch in den experimentellen Resultaten nachgewiesen werden (für  $d = 391 \text{ nm}$  war vermutlich der Bereich der realisierten Tastverhältnisse nicht groß genug). Obwohl also eine qualitative Übereinstimmung bzgl. des Auftretens der Extrema besteht, zeigt Abb. 26 deutliche Unterschiede in Form und Lage der Kurven der TM-Transmissionen bzw. des reziproken Polarisationsverhältnisses, insbesondere bezüglich der Extremalstellen. Die minimal gemessenen TM-Transmissionen sind jeweils höher als rigoros berechnet, das maximale Polarisationsverhältnis im Experiment niedriger als in der Rechnung. Für  $d = 351 \text{ nm}$  sollte  $1/\mathcal{P}_{\text{max}} \approx 50$  erreichbar sein, zum besten gemessenen Wert ergibt sich ein Unterschied um den Faktor 2.

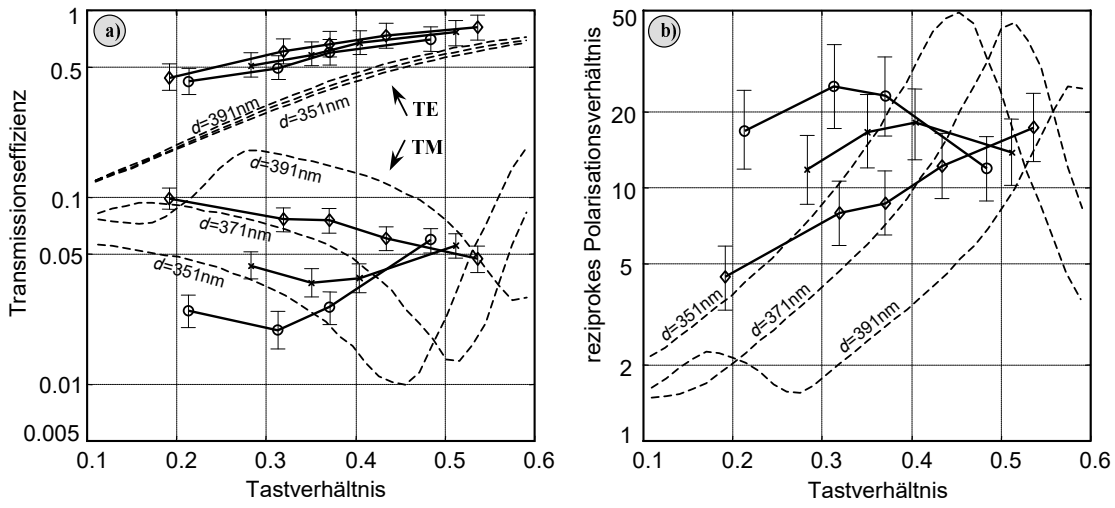


Abbildung 26: Transmissionseffizienzen (a) und resultierendes reziprokes Polarisationsverhältnis  $1/\mathcal{P}$  (b) für Metallstreifengitter in Silber ( $h = 30 \text{ nm}$ ,  $\lambda = 625 \text{ nm}$ ), gemessen für  $d = 351 \text{ nm}$  ( $\circ$ ),  $d = 371 \text{ nm}$  ( $\times$ ), bzw.  $d = 391 \text{ nm}$  ( $\diamond$ ) sowie rigoros berechnet für dieselben Parameter (gestrichelte Linien)

Neben den absoluten Werten an den Extremalstellen ist auch die Kurvenform in deren Umgebung deutlich verschieden. Die experimentellen Kurven verlaufen generell flacher bzw. breiter als die relativ spitzen Extremalstellen der berechneten Kurven. In der Position der Extremalstellen ergibt sich eine Differenz von  $\Delta f \approx 0.15$ , was einem Unterschied in der Grabenbreite  $c$  von  $\Delta c \approx 50 \text{ nm} \dots 55 \text{ nm}$  entspricht.

Die hauptsächliche Ursache für alle genannten Abweichungen liegt sicherlich in der Abweichung der realen Gitterstruktur vom angenommenen ideal-binären Gitterprofil sowie in der damit verbundenen Schwierigkeit der genauen Bestimmung des Tastverhältnisses (vgl. Abschnitt 6.2.2). Würde beispielsweise der gesamte Bereich der experimentell nachgewiesenen Mischschicht als dielektrisches Material angenommen, könnte bei der Bestimmung der Tastverhältnisse statt Gleichung 69 der modifizierte Zusammenhang  $f = (c_2 + 2r)/d$  zugrundegelegt werden. In Abb. 26 ergäbe sich dann eine Verschiebung der experimentellen Werte nach rechts und somit eine bessere Übereinstimmung in der Position der lokalen Extrema zu den berechneten Kurven.

Diese Betrachtung ist aber sehr spekulativ, da rein dielektrische Mischschicht-Eigenschaften eine willkürliche Annahme darstellen. Auch bleiben selbst dann die anderen Abweichungen (Stärke und Form der Extremalstellen) bestehen. Eine endgültige Klärung kann nur bei Berücksichtigung *aller* Abweichungen der realisierten Gitter vom ideal-binären Gitterprofil (sowohl Materialparameter als auch Form der Gitterstege) erreicht werden, genau so, wie dies bereits im Falle des normalen Polarisierungseffekts geschlußfolgert wurde (vgl. Abschnitt 6.1). Eine ausführlichere Betrachtung dieses Problemkomplexes wird in Abschnitt 6.4 vorgenommen.

Der realisierte Polarisierungseffekt von  $1/\mathcal{P} = 25$  ist eine deutliche Verbesserung gegenüber

den experimentellen Ergebnissen für Chromgitter aus Abschnitt 6.1. Zu berücksichtigen ist aber, daß der inverse Polarisierungseffekt relativ empfindlich auf eine Veränderung der Wellenlänge reagiert. Das bei  $\lambda = 625 \text{ nm}$  am besten polarisierende Gitter ( $d = 351 \text{ nm}$ ,  $f = 0.31$ ) wurde zum Vergleich auch bei  $\lambda = 500 \text{ nm}$  untersucht; es ergab sich  $\eta_{\text{TE}} = 64\%$  und  $\eta_{\text{TM}} = 36.5\%$ , und damit  $1/\mathcal{P} = 1.75$ . Zur Polarisation von Weißlicht sind derartige Gitter also wesentlich weniger geeignet als die Chromgitter, deren Funktion auf dem normalen Polarisierungseffekt basiert.

## 6.3 Stark polarisierende Gitter mit abweichender Gittergeometrie

### 6.3.1 Vorbemerkungen

Da die Stärke des normalen Polarisierungseffektes bei binären Metallstreifengittern durch das erreichbare Aspektverhältnis begrenzt ist, wurden Gitter mit nichtbinärem Aufbau (abweichend von Abb. 1) realisiert, die höhere Polarisierungseffekte ermöglichen. Diese Vorgehensweise ist ähnlich zu bereits zitierten Arbeiten [4, 5, 24, 25], wo mit Hilfe der Schattenbedampfung dielektrischer Gitterprofile polarisierende Gitter hergestellt wurden. Die hier verwendete Herstellungstechnologie ist etwas einfacher (keine Schattenbedampfung, sondern Metallüberschichtung). Dies erfolgt mit dem Ziel, einen sehr unkomplizierten Herstellungsprozeß zu erreichen und insbesondere auch die Realisierung richtungs-modulierter Polarisatoren zu ermöglichen.

### 6.3.2 Herstellung

Ausgangspunkt für die Erzeugung der polarisierenden Mikrostrukturen durch Metallüberschichtung ist ein dielektrisches Gitterprofil. Als Material kann Resist oder aber Glas bzw. Quarz verwendet werden. Die Erzeugung von Resistprofilen ist dabei technologisch einfach, da das Gitter direkt in der Schicht erzeugt wird, in der es dann auch verwendet wird, der Technologieschritt des Strukturtransfers also komplett entfällt. Der Resist ist jedoch mechanisch nicht sehr stabil, so daß die langzeitliche Verwendung solcher Gitter bzw. ihre Nutzung in optischen Aufbauten meist vermieden werden soll. Durch Übertragung des Gitterprofils in Glas bzw. Quarz durch Ionenstrahlätzen kann ein stabiles Gitterprofil erzeugt werden. Mit der am IAP der FSU vorhandenen Technologie können gegenwärtig Gitter sowohl in Resist als auch in Glas bzw. Quarz mit Perioden  $d \gtrsim 200 \text{ nm}$  standardmäßig hergestellt werden. Es sind minimalen Linienbreiten im Bereich  $d_{\text{min}} \approx 70 \dots 100 \text{ nm}$  realisierbar, in Quarz auch große Profiltiefen  $h \gtrsim 500 \text{ nm}$ . Die erzeubaren Aspektverhältnisse sind somit für Quarz ( $\mathcal{A} \gtrsim 10$  erreichbar) wesentlich größer als für Metallstreifengitter ( $\mathcal{A}_{\text{max}} \approx 0.5$ ) bzw. Resist ( $\mathcal{A}_{\text{max}} \approx 3$ ). Potentiell können dielektrische Gitterprofile auch durch Abformung hergestellt werden [100, 101], diese Technologie wurde aber im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht verwendet.

Das dielektrische Gitterprofil wird anschließend mit Metall überschichtet, z.B. durch Sput-

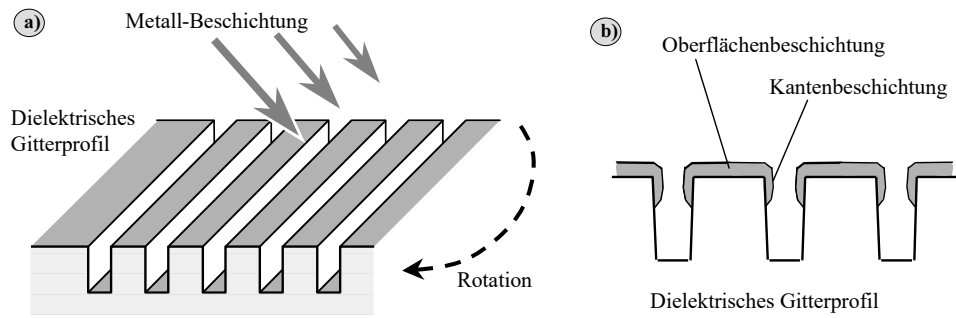


Abbildung 27: a) Prinzip der Metallüberschichtung eines dielektrischen Gitterprofils; b) resultierende Metallbeschichtung (dunkelgrau) auf dem dielektrischen Gitterprofil (schematisch), eine eventuell mögliche dünne Metallisierung im gesamten Graben wird vernachlässigt.

tern. Das Ziel hierbei ist, keine vollständige Schichtbildung auf der gesamten Profilloberfläche zu erreichen, sondern abwechselnd Bereiche mit und ohne Metallbeschichtung. Dies wird erreicht, wenn die Gräben des dielektrischen Profils schmal, aber tief sind (kleines Tastverhältnis, hohes Aspektverhältnis). Da der Anteil der Gräben an der waagerechten Gesamtfläche klein ist, gelangt nur ein kleiner Anteil des auftreffenden Metallteilchenstrahls in die Gräben. Da die Gesamtoberfläche in den Gräben durch die hohen Seitenkanten aber groß ist, verteilen sich diese Teilchen noch auf eine große Oberfläche. Insgesamt ergeben sich im Graben wesentlich schlechtere Bedingungen für das Schichtdickenwachstum als auf der Oberfläche der Resiststege, und im Grabenbereich bildet sich keine bzw. nur eine sehr dünne Metallschicht aus.

Dieser Prozeß kann zusätzlich verstärkt werden, wenn die Metallbeschichtung schräg erfolgt (Abb. 27a). Durch die Abschattung wird hierbei die Beschichtung im unteren Grabenbereich fast völlig verhindert, gleichzeitig erfolgt aber im oberen Bereich der Gräben eine mehr oder weniger starke Seitenwandbeschichtung (Abb. 27b). Nachteilig ist dabei, daß das Beschichtungsergebnis stark von der Ausrichtung der Gittergräben relativ zum einfallenden Metallteilchenstrom abhängt, d.h. die Herstellung richtungsmodulierter Polarisationsfilter wäre nicht möglich. Dies kann durch zusätzliche Probenrotation wieder ermöglicht werden, denn durch die Rotation ergeben sich für alle beliebigen Gitterausrichtungen gleiche Verhältnisse. Der Abschattungseffekt ist dabei nur für den kurzen Moment aufgehoben, in dem der Graben des Gitters exakt parallel zum einfallenden Teilchenstrom steht; der Anteil dieses Augenblicks an der Gesamtbeschichtungszeit ist aber sehr klein, so daß das Ergebnis der Metallüberschichtung qualitativ dem in Abb. 27a gezeigten Profil entspricht.

Der gesamte Herstellungsprozeß besteht aus zwei wesentlichen Schritten (Herstellung der dielektrischen Gitterstruktur, Metallüberschichtung), die beide technologisch relativ gut beherrschbar sind. Er gestattet auch die Erzeugung richtungsmodulierter Polarisationsfilter. Beide Faktoren sind sehr vorteilhaft hinsichtlich potentieller Anwendungen.

Als Nachteil erkennt man, daß die resultierende Gittergeometrie wesentlich komplizierter



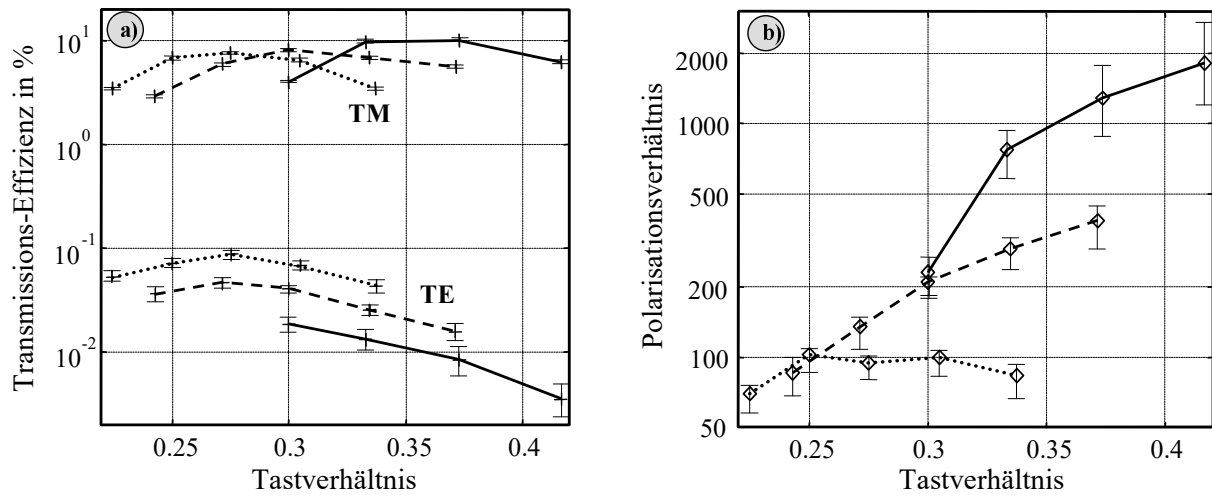


Abbildung 28: gemessene Transmissionseffizienzen (a) und resultierendes Polarisationsverhältnis (b) für mit 80 nm Chrom überschichtete dielektrische Gitter in Resist mit  $h = 300$  nm und  $d = 300$  nm (durchgezogen),  $d = 350$  nm (gestrichelt) bzw.  $d = 400$  nm (gepunktete Linie)

als bei binären Metallstreifengittern ist (vergleichbar z.B. mit [24]). Das Polarisationsverhalten der Gitter wird nicht nur vom Tastverhältnis des dielektrischen Profils beeinflusst, sondern auch von der Dicke der Metallschicht auf den Profilstegen, auf dem oberen Teil der Seitenwände der Gräben, der Tiefe, bis zu der die Seitenwandbeschichtung effektiv stattfindet, sowie auch der Dicke der eventuell im unteren Teil der Gräben entstandenen sehr dünnen Metallüberschichtung. Alle diese Parameter sind schwer meßbar und hängen sehr empfindlich von den Herstellungsbedingungen ab. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit erfolgten hierzu keine ausführlichen Untersuchungen, so daß ein quantitativer Vergleich zwischen Experiment und rigoroser Modellierung nicht vorgenommen werden kann. Ziel der folgenden Darstellung ist die Demonstration der mit diesen Gittern erreichbaren starken Polarisierungseffekte.

### 6.3.3 Experimentelle Ergebnisse

Die experimentelle Untersuchung erfolgte mit dielektrischen Gittern in Elektronenstrahlresist, die mit einer Chromschicht von 80 nm Dicke überschichtet wurden. Die Gitter weisen relativ schmale Gräben auf und wurden unter nahezu senkrechtem Einfall<sup>12</sup> des Metallteilchen-Stromes beschichtet. Die Tiefe des Resistprofils betrug  $h = 300$  nm, es wurden Gitter mit den Perioden  $d = 300$  nm,  $d = 350$  nm und  $d = 400$  nm untersucht.

Die erwarteten (und auch gemessenen) sehr hohen Polarisationsverhältnisse beruhen vor allem auf der sehr geringen TE-Transmission. Um diese Werte genügend genau zu messen, wurde

<sup>12</sup>Aufgrund der geometrischen Verhältnisse in der Beschichtungsanlage ergibt sich ein Winkelspektrum der auf die Probenoberfläche auftreffenden Metallteilchen von ca.  $\pm 10^\circ$ .

der in Abschnitt 3.2.3 erwähnte spezielle Meßaufbau benutzt. Die gemessenen Transmissionen der hergestellten Gitter zeigt Abb. 28a, das resultierende Polarisationsverhältnis Abb. 28b. In dieser Abbildung ist erkennbar, daß für die Perioden  $d = 300 \text{ nm}$  und  $d = 350 \text{ nm}$  das optimale (d.h. zum maximalen Polarisierungseffekt führende) Tastverhältnis außerhalb des experimentell realisierten Bereiches lag. Die Ursache hierfür ist, daß aufgrund der komplizierten Gittergeometrie nicht im vorhinein abschätzbar war, welcher Bereich der Gitterparameter (insbesondere des Tastverhältnisses) den bestmöglichen Polarisierungseffekt ergibt. Die Kurven geben aber dennoch einen guten Überblick über das optische Verhalten der untersuchten Gitter.

Die TE-Transmissionen der Gitter sind aufgrund der hohen aufgetragenen Dicke ( $80 \text{ nm}$ ) der Chrom-Schicht sehr gering (kleiner  $0.1\%$ ), die TM-Transmissionen liegen größenordnungsmäßig bei  $10\%$ . Sowohl für TE- als auch für TM-Polarisation ergibt sich bei kleinen Tastverhältnissen zunächst ein Anstieg der Effizienzen bei Vergrößerung von  $f$ , der durch die breiter werdenden Lücken in der Metallschicht erklärbar ist. Bei weiterem Vergrößern von  $f$  erreichen die Transmissions-Effizienzen ein Maximum und fallen danach wieder ab. Dieses Verhalten kann durch den zunehmenden Einfluß der Kantenbeschichtung der Gräben des dielektrischen Profils erklärt werden, der effektiv wie eine scheinbare Vergrößerung der Metallschichtdicke wirkt. Diese scheinbare Dickenerhöhung dominiert im optischen Resultat offensichtlich gegenüber dem gegenläufigen Effekt des wachsenden Tastverhältnisses, welches ein weiteres Ansteigen der Effizienzen erwarten ließe. Die gemessenen Effizienzen können also durch das Modell der Steg-Oberflächen- und Kantenbeschichtung qualitativ gut erklärt werden. Ob sich darüber hinaus eventuell in den Gräben des Gitterprofils eine dünne Metallbeschichtung gebildet hat, kann weder aus den Meßwerten abgeleitet werden, noch ergab die Untersuchung der Gitter mit dem Rasterelektronenmikroskop hierüber signifikante Aussagen.

Das resultierende Polarisationsverhältnis ist gegenüber den bisher behandelten Gittern deutlich erhöht. Experimentell wurde gezeigt, daß Werte  $\mathcal{P} > 1000$  erreichbar sind. Nachteilig dabei ist die recht geringe Transmissionseffizienz. Die erzielten Werte von  $\mathcal{P}$  können relativ problemlos weiter gesteigert werden, beispielsweise durch Erhöhen der Beschichtungsdicke. Verbunden damit ist aber ein weiteres Absinken der Effizienz (i.a. auch in TM-Polarisation). Das Erhöhen von  $\mathcal{P}$  durch Realisierung größerer Tastverhältnisse erscheint entsprechend Abb. 28 ebenfalls möglich, aber auch dabei muß mit schlechteren Effizienzen gerechnet werden. Die realisierten optischen Eigenschaften stellen also einen recht guten Kompromiß für die praktische Anwendung dar, denn für  $d = 300 \text{ nm}$  wurde  $\mathcal{P} > 1000$  bei immerhin  $\eta_{\text{TM}} = 10\%$  erreicht. Eine weitere Verbesserung von  $\mathcal{P}$  und  $\eta_{\text{TM}}$  ist (für die vorliegende Gittergeometrie) nur bei kleineren Perioden realisierbar, d.h. durch Annäherung an das quasistatische Limit.

Eine Alternative ist das nachträgliche Abätzen der auf der Oberfläche der Stege des dielektrischen Gitterprofils aufgetragenen Metallschicht (vgl. Abb. 27) in einem zusätzlichen Ätzschritt.

In diesem Fall ergibt sich effektiv eine Periodenhalbierung (analog zu [24, 25]), so daß prinzipiell gute Polarisationsseigenschaften bei hohen Transmissionseffizienzen erreichbar sind. Nachteilig bei diesem Schritt ist vor allem, daß die Polarisationswirkung dann *ausschließlich* durch die Seitenwandbeschichtung der Gitterstege hervorgerufen wird. Für die gezielte Anwendung dieser Technologie wäre es erforderlich, daß die Parameter der Seitenwandbeschichtung (Breite, Dicke, ... ) genau genug bestimmt werden können und im Herstellungsprozeß *reproduzierbar* realisierbar sind. Detaillierte Erkenntnisse hierüber liegen bisher nicht vor.

## 6.4 Bewertung der experimentellen Ergebnisse

Der Vergleich aller beschriebenen Ergebnisse zeigt einige wesentliche Gemeinsamkeiten. Für binäre Metallstreifengitter (Abschnitt 6.1 und 6.2) ergibt sich, daß der beste realisierte Polarisationsseffekt zwar jeweils etwas niedriger ist, als entsprechend der rigorosen Rechnung maximal erreichbar gewesen wäre, daß aber beide Werte in derselben Größenordnung liegen. Damit ist die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment deutlich besser als in den bisherigen Untersuchungen an binären Metallstreifengittern [30, 31], wo der Unterschied durchgängig ein bis zwei Größenordnungen betrug. Die Transmission in der zu nutzenden Polarisationsrichtung (TM bei normalem Polarisationsseffekt, TE beim inversen Effekt) war dabei jeweils etwas höher, als gemäß der rigorosen Modellierung zu erwarten war. Beide Eigenschaften sind hinsichtlich potentieller Anwendungen als günstig einzuschätzen.

Für die Abhängigkeit der Effizienzen bzw. des Polarisationsverhältnisses von den geometrischen Gitterparametern, speziell von Periode und Tastverhältnis, ergab sich im Rahmen der durchgeführten systematischen Untersuchung dieser Parameter durchgängig eine qualitative Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment. Insbesondere konnten lokale Extrema in den Effizienzen bzw. im Polarisationsverhältnis, die aus der rigorosen Rechnung hervorgehen (Gitter aus Abschnitt 6.2) bzw. zumindest qualitativ erklärbar sind (Gitter aus Abschnitt 6.3), auch experimentell nachgewiesen werden. Beim Übergang vom normalen zum inversen Polarisationsseffekt (Abschnitt 6.1.2) ergab sich ebenfalls eine gute Übereinstimmung. Somit stellt das den rigorosen Rechnungen zugrundeliegende Modell des ideal binären Metallstreifengitters eine akzeptable Näherung für die tatsächlich hergestellten Gitter dar.

Für alle untersuchten Metallstreifengitter stellt sich jedoch heraus, daß sich beim Einfluß des Tastverhältnisses  $f$  ein merklicher quantitativer Unterschied zwischen Modellierung und Experiment ergibt. Die hauptsächliche Ursache hierfür muß vermutlich — wie bereits erläutert — in der Abweichung der hergestellten Gitter vom angenommenen ideal-binären Gitterprofil gesucht werden. Diese besteht im wesentlichen in der Form sowie in den Materialeigenschaften bzw. der Zusammensetzung der Metallstege. Zur Klärung dieses Problems ist eine grundsätzlich tiefergehende Herangehensweise sowohl im theoretischen Ansatz (Abgehen vom Modell des

ideal-binären Metallstreifengitters) als auch der experimentellen Untersuchung nötig. Letzteres bedeutet insbesondere:

- genaue Messung des realisierten Gitterprofils;
- Bestimmung der Stärke von Fluktuationen im Gitterprofil (Rauhigkeit der Oberflächen, laterale Schwankungen von Tastverhältnis, Periode und evtl. Profiltiefe);
- Bestimmung der Materialeigenschaften der Metallstege nach der Strukturierung;
- Untersuchung der Inhomogenität der Materialeigenschaften im Randbereich (insbesondere Mischschichten);
- Überprüfung, wie stark beim Herstellungsprozeß der Metallstreifen eine Veränderung des Substrates (Materialeigenschaften bzw. Profilveränderung) stattfindet;
- Überprüfung, ob verschiedene Präparations- bzw. Meßverfahren bei der Messung der geometrischen Gitterparameter eine systematische Meßwertverfälschung verursachen können.

Während die theoretischen Methoden hierfür, d.h. die Analyse linearer Gitter mit beliebigen Profilen und verschiedenen Materialeigenschaften, prinzipiell vorhanden sind (vgl. [86, 102]), stellen die oben formulierten Anforderungen an die experimentelle Untersuchung eine große Herausforderung dar. Insbesondere die genügend sichere Messung von Materialeigenschaften in den metallischen Stegen (bzw. in deren Randbereichen mit Volumina von lediglich einigen  $(10\text{ nm})^3$ ) erscheint aus gegenwärtiger Sicht sehr problematisch. Die experimentellen Daten sind jedoch unbedingt nötig, da sie als Eingangsparameter auch für die theoretische Modellierung der Gitter benötigt werden. Bisherige stichprobenartige Versuche, das experimentell beobachtete Verhalten der Metallstreifengitter mittels modifizierter Ansätze zu modellieren (Annahme eines trapezförmigen Gitterprofils, Annahme einer dielektrischen Übergangsschicht am Rand der Metallstege) haben gezeigt, daß in einzelnen (aber nicht in allen) Fällen eine etwas bessere Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erzielt werden kann, dabei aber jeweils unterschiedlichste Annahmen über die Modifizierungen des Modells bzw. die zusätzlichen Gitterparameter nötig sind [103]. Um allgemeingültige Aussagen zu gewinnen, müssen somit umfangreiche systematische Untersuchungen durchgeführt werden. Wegen des absehbaren Umfangs derartiger Untersuchungen und der o.g. existierenden Probleme auf experimentellem Gebiet kann dieser Problemkomplex im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht endgültig geklärt werden.

## 7 Technologische Einflüsse auf die Gitterqualität

### 7.1 Einleitung

Im Verlauf der experimentellen Arbeit stellte sich heraus, daß die mit der Elektronenstrahlbelichtungsanlage LION LV1 im CPC-Modus hergestellten Gitterstrukturen bestimmte Besonderheiten aufweisen, die ihre optischen Eigenschaften spürbar beeinflussen. Dies sind:

- richtungsabhängige Dosisabweichungen im Belichtungsprozeß, die zu Schwankungen des Tastverhältnisses führen;
- Auswirkungen des Adressinkrements der Tisch-Positionierung.

Im folgenden sollen beide Aspekte diskutiert sowie bisher gefundene Wege zu ihrer (zumindest teilweisen) Vermeidung aufgezeigt werden.

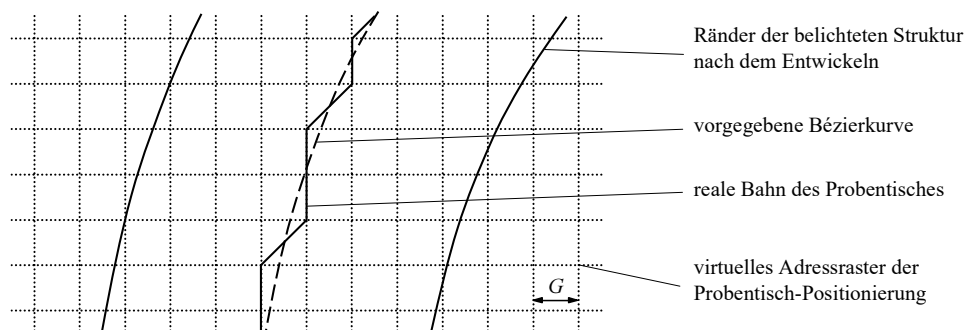


Abbildung 29: Schema der Bahnkurvenbelichtung im CPC-Modus

Hierzu ist es erforderlich, noch einmal näher auf das bereits in Abschnitt 3.1.3 erläuterte Schreibverfahren „Continuous-Path-Control“ einzugehen. Die gestrichelte starke Linie in Abb. 29 stellt eine beliebige vorgegebene (d.h. zu belichtende) Bézier-Kurve dar. Die durchgezogene dicke Zickzacklinie entspricht der tatsächlichen Bewegung des Probestisches, die zwischen den Schnittpunkten des virtuellen Rasters der adressierbaren Tischpositionen (gestrichelte dünne Linien) entlang der vorgegebenen Kurve erfolgt und dabei aus achsenparallelen und diagonalen Stücken besteht. Die Berechnung dieser Bahn erfolgt in der internen Belichtungssteuerung des LION LV1 anhand der vorgegebenen Bézier-Kurve und ist vom Anwender nicht beeinflussbar.

Diese Zickzacklinie ist jedoch nicht das endgültige und beobachtbare Ergebnis nach dem Strukturierungsprozeß. Durch die Aufstreuung der Elektronen im Resist und den nachfolgenden Entwicklungsprozeß entsteht im Resist eine relativ breite Linie, deren Kanten in Abb. 29 durch die dünnen durchgezogenen Linien markiert sind. Da die Periode des virtuellen Rasters (rund 10 nm) wesentlich kleiner als die herstellbaren Linienbreiten (minimal um 50 nm, meist um 100 nm) ist, und ferner die Streuung der Elektronen im Resist und der Entwicklungsvorgang eine glättende Wirkung haben, sind die Kanten der belichteten Struktur weitgehend glatt. Die Position der belichteten Linie (Symmetrieachse) entspricht dabei dem gemittelten Verlauf der

Probentischbewegung. Zusammenfassend ergibt sich:

1. Die vorgegebene Bézier-Kurve wird nicht direkt belichtet, sondern ihre Projektion auf das virtuelle Raster der adressierbaren Tischpositionen. Diese Bahn besteht aus achsenparallelen und diagonalen Elementen.
2. Die hieraus nach Belichtung und Entwicklung entstehende Struktur ist eine glatte Linie, in der die achsenparallelen bzw. diagonalen Bahnstücken nicht sichtbar sind. Ihre Symmetrieachse entspricht dem gemittelten Verlauf der Probentischbewegung.

## 7.2 Richtungsabhängige Dosisabweichungen

Prinzipiell können mit dem LION LV1 gerade und gekrümmte Linien beliebiger Richtung belichtet werden. Die erläuterte Zerlegung der vorgegebenen Linie in achsenparallele und diagonale Abschnitte der realen Probentischbewegung führt dabei aber zu unterschiedlichen Resultaten. Wir betrachten hierzu zunächst drei verschiedene gerade Linien, und zwar eine achsenparallele (a), eine um  $26.5^\circ$  (b) sowie eine um  $45^\circ$  (c) gegen eine Koordinate geneigte Linie (Abb. 30).



Abbildung 30: Resultat der CPC-Belichtung für gerade Linien unterschiedlicher Neigung (gestrichelt: vorgegebene Bezierkurve; durchgezogen: tatsächliche Bewegung des Probentisches)

Für die achsenparallele Linie (a) besteht die tatsächliche Bahn des Probentisches vollständig aus achsenparallelen Stücken. Die Realisierung der richtigen Belichtungsdosis erfolgt dabei intern in der Belichtungssteuerung des LION LV1, indem für jeden Abschnitt zwischen zwei Schnittpunkten des virtuellen Positionierungs-Rasters ein Zeitintervall  $\Delta t$  vorgegeben wird.

Für die um  $45^\circ$  geneigte Linie (c) besteht die tatsächliche Bahn des Probentisches vollständig aus diagonalen Stücken. Um für diese Linie dieselbe Belichtungsdosis wie für die achsenparallele Linie zu realisieren, muß das Zeitintervall für die Abarbeitung jedes einzelnen diagonalen Bahnschnittes auf  $\Delta t \cdot \sqrt{2}$  erhöht werden. Dies erfolgt ebenfalls automatisch in der Belichtungssteuerung des LION LV1.

Aus der bisherigen Beschreibung wird deutlich, daß die Belichtungszeit beliebiger Linien im CPC-Modus jeweils genau der Länge der realen, vom Probentisch abgefahrenen Bahn (d.h. der

durch die Projektion auf das virtuelle Positionierungs-Raster entstehenden Zickzacklinie) entspricht. Für die um  $26.5^\circ$  gegen eine Koordinate geneigte Linie ( $b$ ) besteht diese Bahn gerade aus je drei achsenparallelen und diagonalen Stücken. Die Belichtungszeit für diese Linie beträgt also  $3(1 + \sqrt{2}) \cdot \Delta t$ . Im vorigen Abschnitt wurde jedoch dargelegt, daß die letztendlich entstehende Struktur dem gemittelten Verlauf der Probestischbewegung entspricht, hier also eine gerade Linie der Länge  $\sqrt{(6)^2 + (3)^2} \cdot G = \sqrt{45} \cdot G$  ist. Um für diese Linie dieselbe Belichtungs-dosis wie für die Linien ( $a$ ) und ( $c$ ) zu erhalten, müßte die Belichtungszeit  $\sqrt{45} \cdot \Delta t$  betragen. Der Vergleich von Sollbelichtungszeit und tatsächlich resultierender Belichtungszeit ergibt  $3(1 + \sqrt{2}) / \sqrt{45} = 1.0797$ , d.h. die Linie ( $b$ ) erhält eine um ca. 8% zu hohe Belichtungs-dosis. Werden alle drei Linien ( $a$ ), ( $b$ ) und ( $c$ ) bei sonst gleichen Parametern belichtet und entwickelt, führt dies zu einer größeren Linienbreite der Linie ( $b$ ); im Fall von Gittern resultiert eine Vergrößerung des Tastverhältnisses.

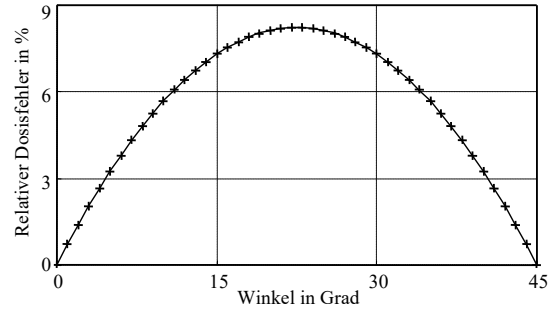


Abbildung 31: relativer winkelabhängiger Dosisfehler bei Belichtung im CPC-Modus entsprechend Gleichung 71 bzw. 72 (Linie) sowie Approximation durch eine parabolische Funktion entsprechend Gleichung 73 (Marker)

Diese Dosisabweichung ist letztlich eine Folge der Dreiecksungleichung, d.h. der unterschiedlichen Länge der vom Probestisch zurückgelegten Bahn und der Länge der im Resist entstehenden Struktur (Linie). Für den allgemeinen Fall einer zu belichtenden sehr langen geraden Linie der Länge  $L$ , die unter einem beliebigen Winkel  $\alpha$  gegen eine Koordinatenachse geneigt ist ( $\alpha \leq 45^\circ$ ), kann man aus einfachen geometrischen Überlegungen ableiten, daß die Länge der vom Probestisch real zurückgelegten Bahn

$$l_{\text{Tisch}} = L \cdot (\cos \alpha + [\sqrt{2} - 1] \cdot \sin \alpha) \quad (70)$$

beträgt. Der winkelabhängige relative Dosisfehler, der aus diesem Weglängenunterschied resultiert, ist dann  $\delta_{\text{Dosis}} = (l_{\text{Tisch}}/L) - 1$ , und damit ergibt sich

$$\delta_{\text{Dosis}}(\alpha) = (\sqrt{2} - 1) \cdot \sin \alpha + \cos \alpha - 1 \quad (71)$$

$$= K \cdot \cos(22.5^\circ - \alpha) - 1 \quad (72)$$

$$\text{mit: } K = \sqrt{8} \cdot \sin(22.5^\circ) = 1.08239 \dots$$

In der Form nach Gleichung 72 zeigt sich, daß diese Funktion symmetrisch im Winkelintervall

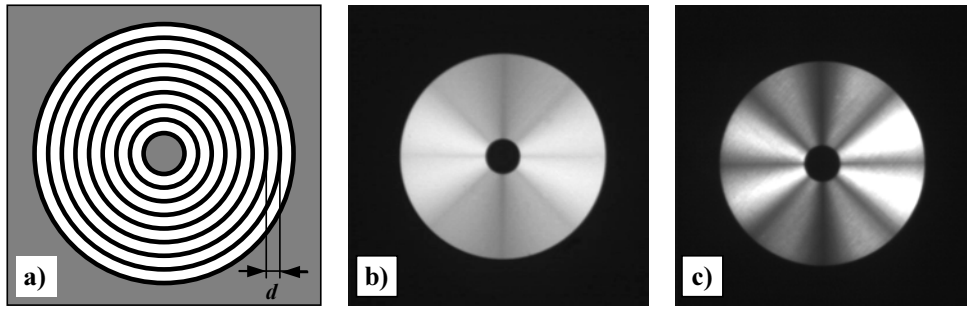


Abbildung 32: zirkuläre Metallstreifengitter: schematischer Aufbau (a) sowie mikroskopische Aufnahmen solcher Gitter mit schwacher (b) bzw. starker (c) achtzähliger Modulation des Tastverhältnisses

$(0^\circ, 45^\circ)$  ist. Dies zeigt auch Abbildung 31. Der relative Dosisfehler erreicht sein Maximum von 8.24% für einen Winkel von  $\alpha = 22.5^\circ$ . Darüber hinaus zeigt Abb. 31, daß  $\delta_{\text{Dosis}}(\alpha)$  durch eine parabolische Funktion sehr genau approximiert werden kann:

$$\delta_{\text{Dosis}}(\alpha) = 0.08221 \cdot \left(1 - \left[\frac{\alpha}{22.5^\circ} - 1\right]^2\right) + \varepsilon \quad (73)$$

mit:  $|\varepsilon| < 2 \cdot 10^{-4} \quad \forall \alpha: 0^\circ \leq \alpha \leq 45^\circ$ .

Eine generelle Korrektur der richtungsabhängigen Dosisabweichung ist zunächst nicht möglich, da der Algorithmus zur Dosisberechnung vom Hersteller vorgegeben ist.<sup>13</sup> Je nach Art der Struktur muß daher vom Nutzer nach Möglichkeiten zur individuellen Korrektur gesucht werden.

Für gerade, nicht achsenparallele Gitterlinien kann die Dosis für alle Linien entsprechend den Gleichungen 71 bis 73 sehr einfach korrigiert werden. Im Fall gekrümmter Gitterlinien (z.B. bei zirkulären Gittern, siehe Abb. 32a) muß dagegen jede Linie zunächst in viele Teilabschnitte aufgeteilt werden, deren Dosis dann jeweils individuell entsprechend ihrem (mittleren) Neigungswinkel  $\alpha$  zu korrigieren ist. Diese Zerlegung führt aber u.a. zu einer enormen Vergrößerung der zur Belichtung notwendigen Datenmenge, bei zirkulären Gittern z.B. zu einer Verzehnfachung bei Benutzung von nur zwei verschiedenen Korrekturfaktoren pro  $45^\circ$ -Bogenssegment. Daher ist die Korrektur der richtungsabhängigen Dosisabweichung bei zirkulären Gittern nicht praktikabel.

Die Auswirkungen der nicht korrigierten Dosisabweichung auf die optischen Eigenschaften zirkularer Metallstreifengitter hängen stark vom übrigen Herstellungsprozeß ab, insbesondere von der Veränderung des Tastverhältnisses bei der Strukturübertragung in die Metallschicht (vergl. Abschnitt 3.1.6). Diesen Einfluß verdeutlichen Abb. 32b und 32c, die Mikroskop-Aufnahmen zweier zirkularer Metallstreifengitter zeigen. Beide Gitter sind mit unpolarisiertem Licht in Transmission beleuchtet; die Gitterperiode von  $d = 300 \text{ nm}$  wird nicht aufgelöst. Die in beiden Teilbildern erkennbare zweizählige Helligkeitsmodulation (Transmission entlang einer gedachten waagerechten x-Achse höher als entlang einer gedachten senkrechten y-Achse) beruht

<sup>13</sup>Gegenwärtig wird vom Hersteller ein verbesserter Algorithmus zur Dosisberechnung erprobt.



auf der Eigenpolarisation des Mikroskops (vgl. Abschnitt 3.2.3), die effektiv wie eine schwache elliptische Polarisation des beleuchtenden Lichtstrahls wirkt.

Abgesehen von diesem Effekt (der nicht auf die Metallstreifengitter selbst zurückgeht), sind die Unterschiede in Teilbild b) und c) deutlich erkennbar. Das Gitter in Teilbild b) wurde mit einem Ionenstrahl-Ätzprozeß hergestellt, bei dem das Tastverhältnis im Vergleich zur Resistmaske weitgehend unverändert blieb. Durch die winkelabhängigen Dosisabweichung beim Belichtungsprozeß entsteht damit im Metallstreifengitter letztendlich eine moderate Änderung der Transmissionseffizienz (schwache achtzählige Helligkeitsmodulation in Abb. 32b) bzw. des Polarisationsverhaltens. Unter Berücksichtigung der winkelabhängig modulierten optischen Eigenschaften ist ein solches Gitter z.B. zur Polarisationsanalyse verwendbar.

Das Gitter aus Teilbild c) wurde mit einem anderen Ionenstrahl-Ätzprozeß hergestellt, bei dem das Ätzratenverhältnis zwischen Resist und Chrom stark vom Tastverhältnis der Resiststruktur abhing. Im Resultat ist das Gitter für Winkel  $\alpha = 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, \dots$  (bezogen auf die Bildränder, die hier parallel zum Belichtungs-Koordinatensystem liegen), also an Stellen mit relativ kleinem Tastverhältnis, nicht vollständig in die Metallschicht hineingeätzt, so daß diese Stellen bei Beleuchtung in Transmission dunkel erscheinen. An Stellen mit durch den o.g. Effekt vergrößertem Tastverhältnis ( $\alpha = 22.5^\circ, 67.5^\circ, 112.5^\circ, \dots$ ) ist hingegen die Struktur bereits überätzt, d.h. auch die Stege des Metallstreifengitters sind vollständig abgeätzt. Diese Stellen erscheinen in Transmission hell und weisen keinerlei Polarisationswirkung mehr auf. Das Gitter (soweit man es noch als solches bezeichnen kann) ist nicht verwendbar.

Die Eigenschaften des Ätzprozesses entscheiden also, ob die richtungsabhängige Dosisabweichung toleriert werden kann oder letztendlich zu einer unbrauchbaren Mikrostruktur führt. Dies zeigt die Notwendigkeit, alle einzelnen Schritte eines Herstellungsprozesses sorgfältig aufeinander abzustimmen, um am Ende verwertbare Mikrostrukturen zu erhalten.

## 7.3 Auswirkungen des Adressinkrements

### 7.3.1 Auftretende Effekte

Im Abschnitt 6.1.2 wurde erwähnt, daß die Transmission der dort besprochenen Gitter nicht völlig homogen über die Gitterfläche hinweg war. Abbildung 33 zeigt als Beispiel eines der hergestellten Gitter. Die Grenzen der Gebiete unterschiedlicher Helligkeit verlaufen senkrecht, d.h. parallel zum Verlauf der Gitterlinien (die in diesem Bild nicht aufgelöst werden können).

Als Ursache für diesen ungewollten und störenden Effekt ergab sich eine Kombination aus dem Einfluß des in Abschnitt 3.1.3 genannten Adressinkrements  $G$  der Tisch-Positionierung und der im vorliegenden Fall gewählten Schreibstrategie. Letztere bestand darin, daß (um die genaue Variation des Tastverhältnisses zu ermöglichen) zur Herstellung eines Gittergrabens *zwei*

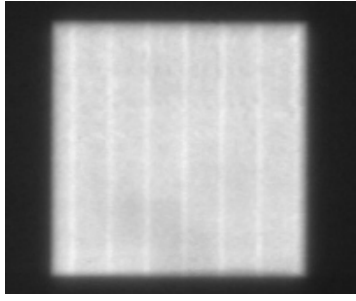


Abbildung 33: Transmissionsunterschiede eines Subwellenlängen-Metallstreifengitters aufgrund von Schwankungen des Tastverhältnisses (Mikroskop-Aufnahme mit unpolarisiertem Licht in Transmission,  $d = 410 \text{ nm}$ ,  $h = 30 \text{ nm}$  in Chrom)

dicht nebeneinanderliegende Linienbelichtungen durchgeführt wurden. Im nachfolgenden Entwicklungsprozeß entsteht dann ein einziger, aber dafür breiterer Gittergraben, dessen Breite durch den Abstand der zwei nebeneinander belichteten Linien gut beeinflussbar ist.

Dieser vorgegebene Abstand betrug für das in Abbildung 33 gezeigte Gitter  $s_{\text{soll}} = 100 \text{ nm}$ . Da die Positionierung aller Linien jedoch im virtuellen Raster des Adressinkrements erfolgt, kann der tatsächlich realisierte Linienabstand  $s_{\text{ist}}$  nur ein ganzzahliges Vielfaches der Rasterperiode  $G$  sein, d.h. für einen beliebigen vorgegebenen Wert  $s_{\text{soll}}$  ergibt sich

$$s_{\text{ist}} = u_{1/2} \cdot G \quad \text{mit:} \quad u_{1/2} = \begin{cases} \text{floor}\{s_{\text{soll}}/G\} \\ \text{ceil}\{s_{\text{soll}}/G\} \end{cases}, \quad (74)$$

wobei mit „floor“ das Abrunden und mit „ceil“ das Aufrunden auf den nächsten ganzzahligen Wert bezeichnet werden soll. Welche von den beiden Möglichkeiten realisiert wird, hängt von der globalen Position der Struktur im gesamten virtuellen Positionierungs-Raster ab und kann nicht allgemein vorhergesagt werden.

Im Fall des Gitters aus Abbildung 33 ergab sich, daß für eine gewisse aufeinanderfolgende Zahl von Linien immer der kleinere mögliche Linienabstand von  $s_{\text{ist}} = 10 \cdot G = 98.9049... \text{ nm}$  realisiert wurde, und daran anschließend ein Bereich von Linien folgte, in dem immer der größere Linienabstand von  $s_{\text{ist}} = 11 \cdot G = 108.7954... \text{ nm}$  realisiert wurde. Der resultierende Wechsel des Tastverhältnisses ist dann als Hell-Dunkel-Wechsel im optischen Mikroskop erkennbar (Abb. 33). Die Ursache für die inhomogene Transmission der Gitter ist damit gefunden.

Der beschriebene Effekt kann (nachdem er erkannt wurde) durch Vermeidung der Doppellinien-Belichtungen verhindert werden. Das zugrunde liegende Problem, der Einfluß des Adressinkrements  $G$ , ist aber damit nicht gelöst. Dieser Einfluß ist ein generelles Problem bei der Gitterherstellung im CPC-Modus und wurde deshalb im Rahmen der vorliegenden Arbeit ausführlich untersucht, indem die Beugungsbilder verschiedener Reflexionsgitter vermessen wurden.<sup>14</sup>

<sup>14</sup>Design und Herstellung der Gitter wurden vom Verfasser durchgeführt, die Vermessung der Beugungsbilder erfolgte am Streulicht-Meßplatz des FhG-IOF Jena.

Bei diesen Untersuchungen ist zu beachten, daß das Adressinkrement der Elektronenstrahlbelichtungsanlage LION LV1 herstellerseitig verändert worden war. Es beträgt für alle nachfolgenden Gitter

$$\tilde{G} = \frac{632.99144... \text{ nm}}{256} = 2.4726228... \text{ nm} . \quad (75)$$

Die untersuchten Gitterperioden sind wesentlich größer als  $\tilde{G}$ . In den folgenden Schemata wird dieser Unterschied reduziert, um den Einfluß des Adressrasters deutlicher darzustellen.

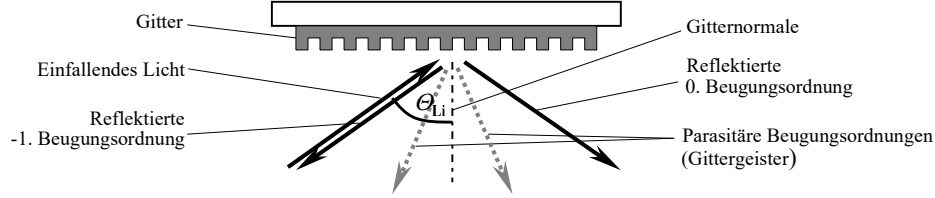


Abbildung 34: Entstehung des Reflexions-Beugungsbildes in Littrow-Konfiguration

Die Untersuchung der Beugungsbilder erfolgte in der sogenannten Littrow-Konfiguration, d.h. der Einfallswinkel des Lichtes auf das Gitter betrug

$$\Theta_{\text{Li}} = \arcsin \left( \frac{\lambda}{2 \cdot d} \right) . \quad (76)$$

Dann liegen die 0. und -1. Beugungsordnung in Reflexion symmetrisch zur Gitternormalen (Abb. 34). Ist das Gitter fehlerlos, so ist im Bereich zwischen 0. und -1. Beugungsordnung nur Streulicht meßbar. Durch den Einfluß des Adreßinkrements  $\tilde{G}$  kommt es aber zu Abweichungen der Realpositionen der Gitterstege von der vorgesehenen ideal-periodischen Anordnung (Abb. 35), die im Beugungsbild parasitäre Beugungsordnungen bzw. „Gittergeister“ verursachen [104]. Durch Vermessung des Gitter-Beugungsbildes können somit auch sehr kleine Gitterfehler aufgrund des Einflusses des Adreßinkrements festgestellt werden.

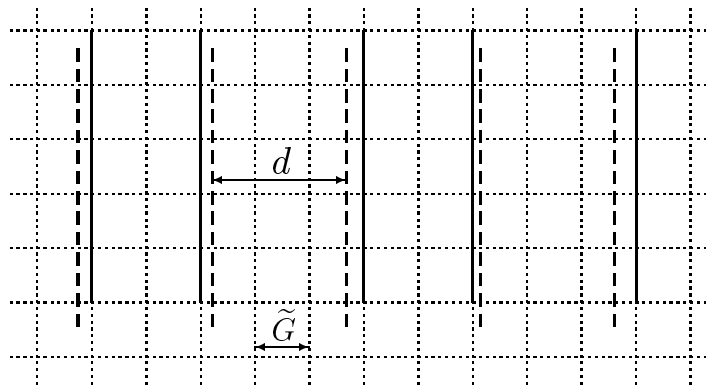


Abbildung 35: Abweichungen der Realposition von Gitterlinien (durchgezogen) von der vorgegebenen ideal-periodischen Anordnung (gestrichelt), falls die Gitterperiode  $d$  kein ganzzahliges Vielfaches der Periode  $\tilde{G}$  des Adressrasters im CPC-Modus (gepunktet) ist

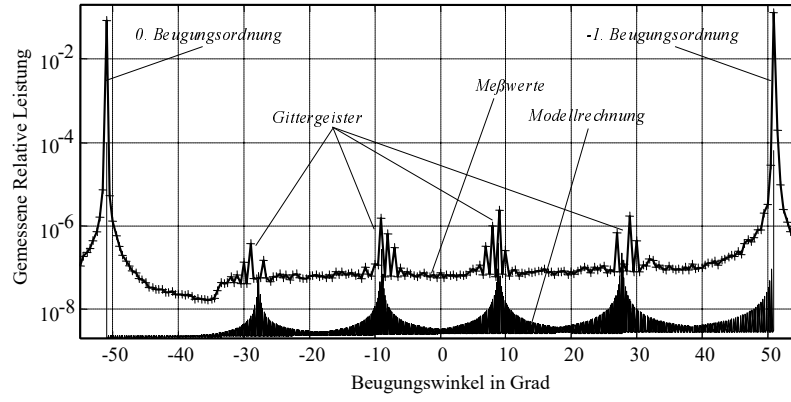


Abbildung 36: Leistung im Beugungsspektrum eines Reflektionsgitters (normiert auf Leistung des einfallenden Strahls) mit  $d = 342.21 \text{ nm}$ ,  $\lambda = 532 \text{ nm}$ ,  $\Theta_{\text{Li}} = 51.01^\circ$ ; sowie berechnetes Fourierspektrum (in Ordinatenrichtung willkürlich skaliert)

Das Beugungsbild eines Gitters mit vorgegebener Periode  $d = 342.21 \text{ nm}$  zeigt Abb. 36. Diese Periode ist kein ganzzahliges Vielfaches des Adressinkrements  $\tilde{G}$  ( $342.21 \text{ nm}/\tilde{G} = 138.3995\dots$ ), und man erkennt in Abbildung 36 deutlich die parasitären Beugungsordnungen. Zur Überprüfung, ob diese tatsächlich durch den Einfluß von  $\tilde{G}$  entstehen, wurde das Beugungsbild mittels Fouriertransformation modelliert, wobei die Realpositionen der Gitterstege im virtuellen Adressraster berücksichtigt wurden (keine ideal-periodische Anordnung). Die resultierende Kurve ist ebenfalls in Abbildung 36 eingetragen, wobei sie in Ordinatenrichtung so skaliert wurde, daß ein guter Vergleich mit den Meßwerten möglich ist. Es ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung in Lage und Form beider Kurven. Der wesentliche Einfluß des Adressinkrements  $\tilde{G}$  auf die optische Gitterqualität ist somit nachgewiesen.

### 7.3.2 Vermeidung des Effektes bei achsenparallelen Gittern

Um das Auftreten parasitärer Beugungsordnungen zu verhindern, muß die Gitterperiode so gewählt werden, daß sie ein ganzzahliges Vielfaches des Adressinkrements ist, also

$$d = u \cdot \tilde{G} \quad \text{mit } u \in \mathbb{N}. \quad (77)$$

Diese Bedingung wurde experimentell überprüft. Als Gitterperiode wurde  $d = 341.2219464 \text{ nm}$  vorgegeben, so daß Gleichung 77 mit  $u = 138$  erfüllt ist. Abbildung 37 zeigt das Beugungsbild. Im Rahmen der Meßgenauigkeit ist keine parasitäre Beugungsordnung mehr erkennbar. Dies bedeutet, daß der Einfluß des Adressinkrements durch dessen Berücksichtigung bei der Wahl der Gitterperiode vollständig eliminiert werden kann, und zusätzlich, daß keine anderen Ursachen für derartige Gitterfehler vorliegen. Abbildung 37 demonstriert somit die hohe optische Gitterqualität, die durch das CPC-Belichtungsverfahren möglich ist.

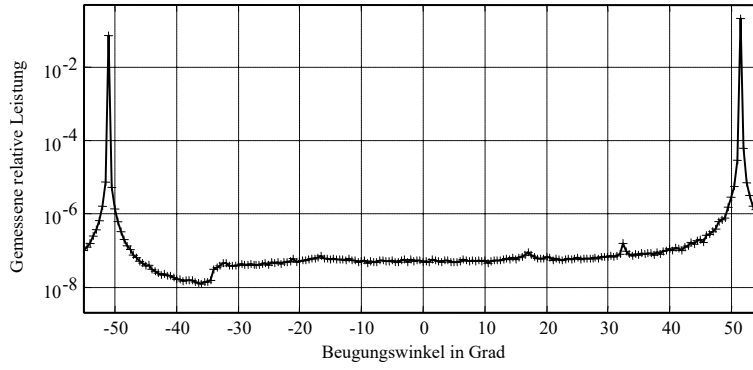


Abbildung 37: Leistung im Beugungsspektrum eines Reflektionsgitters (normiert auf Leistung des einfallenden Strahls) mit  $d = 341.221... \text{ nm}$ ,  $\lambda = 532 \text{ nm}$ ,  $\Theta_{\text{Li}} = 51.22^\circ$

### 7.3.3 Nicht-achsenparallele Gitter

Das im vorigen Abschnitt geschilderte Verfahren ist nur möglich, falls die Gitterperiode  $d$  nicht völlig fest vorgegeben ist. Ist  $d$  fixiert und Gleichung 77 dabei nicht erfüllt, können parasitäre Beugungsordnungen nicht vermieden werden. Sollen darüber hinaus mehrere Gitter mit fein abgestufter Periodenvariation hergestellt werden, können die parasitären Beugungsordnungen zu einer sehr unterschiedlichen optischen Qualität der Gitter führen.

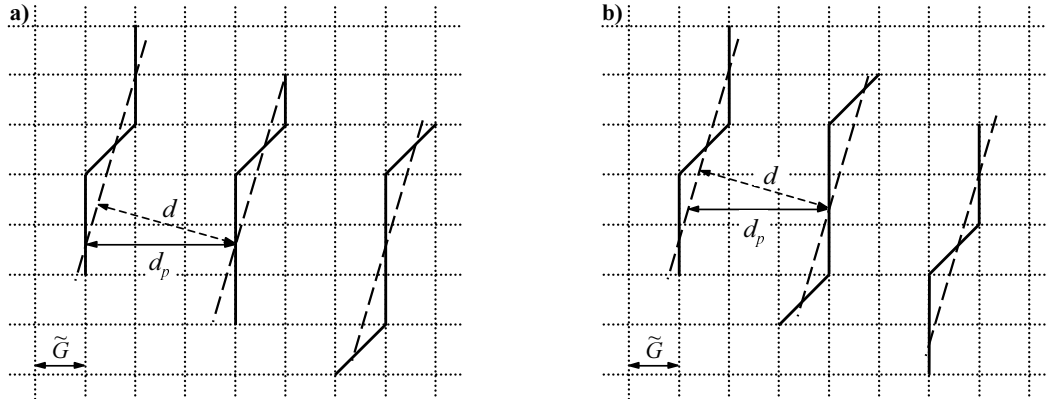


Abbildung 38: gedrehte Lage der Gitterlinien (gestrichelt: Sollposition, durchgezogen: Bahn des Probestisches) gegenüber dem Adressraster (gepunktet), wobei die Projektion  $d_p$  der Gitterperiode ein Vielfaches der Rasterperiode  $\tilde{G}$  ist (a) oder nicht ist (b)

Eine Veränderung dieses Zustandes kann durch eine gedrehte Lage der Gitter gegenüber dem virtuellen Adressraster erreicht werden. Die Verschiebung der Realposition der Gitterlinien, die bei achsenparalleler Lage über die ganze Länge der Gitterlinie konstant ist (vgl. Abb. 35), erfolgt nunmehr lokal unterschiedlich (Abb. 38). Die Symmetrieachse der resultierenden Resiststruktur folgt dann weitgehend der vorgegebenen Bahnkurve, fällt aber nicht vollständig mit ihr zusammen. Die Abweichung zwischen beiden kann entlang der Gitterlinie variieren, womit letztendlich eine schwach schlängelnde Linie im Resist entsteht. Bei der gedrehten Lage der Gitterlinien kann

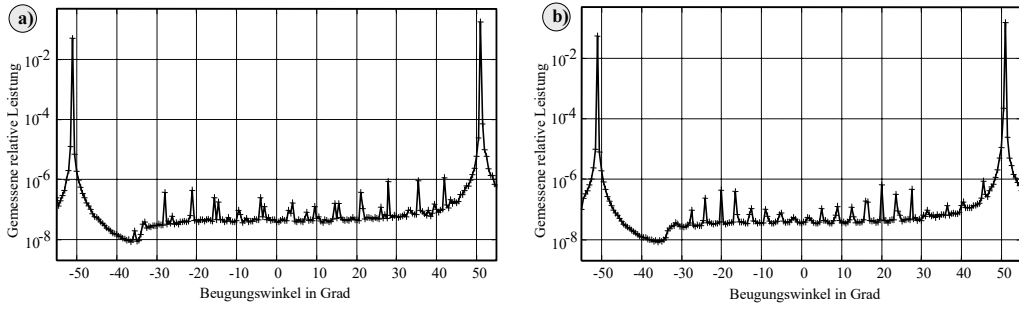


Abbildung 39: Leistung im Beugungsspektrum eines Reflektionsgitters (normiert auf Leistung des einfallenden Strahls) für gedrehte Gitter mit einem Drehwinkel  $\xi = 5.3273^\circ$  bei  $\lambda = 532 \text{ nm}$ , a)  $d = 342.21 \text{ nm}$ , somit  $d_p = 139 \cdot \tilde{G}$ ; b)  $d = 342.8 \text{ nm}$ , somit  $d_p = 139.239... \cdot \tilde{G}$

es zwei verschiedene Fälle geben: Die Projektion  $d_p$  der vorgegebenen Gitterperiode  $d$  auf das Adressraster kann ein ganzzahliges Vielfaches von  $\tilde{G}$  sein (Abb. 38a) oder nicht (Abb. 38b). Es wurde experimentell überprüft, ob sich hieraus Unterschiede im Beugungsbild ergeben.

Für einen Rotationswinkel  $\xi = 5.3273^\circ$  liegt die Gitterperiode  $d = 342.21 \text{ nm}$  im Adressraster ( $d_p = 139 \cdot \tilde{G}$ ), während sich für eine Gitterperiode von  $d = 342.8 \text{ nm}$  keine Anpassung von  $d_p$  an  $\tilde{G}$  ergibt. Die resultierenden Beugungsbilder (Abb. 39) zeigen in beiden Fällen relativ regelmäßig verteilte parasitäre Beugungsordnungen. Obwohl Anordnung und Stärke im Detail etwas verschieden sind, ergibt sich qualitativ kein Unterschied. Die parasitären Beugungsordnungen sind also bei gedrehten Gittern relativ unabhängig davon, ob  $d_p$  an das Adressraster angepaßt ist oder nicht. Ihre Ursache liegt stattdessen im erläuterten leicht schlängelnden Verlauf der Gitterlinien, der zu lokalen Abweichungen der Gitterperiode führt, die über die Gitterfläche verteilt vielfach auftreten und sich somit als systematische Gitterfehler äußern.

Vergleicht man Abb. 39a ( $d = 342.21 \text{ nm}$ ,  $\xi = 5.327...^\circ$ ) mit Abb. 36 (ebenfalls  $d = 342.21 \text{ nm}$ , aber  $\xi = 0^\circ$ ), so erkennt man, daß sowohl die Maximalstärke der parasitären Beugungsordnungen reduziert wurde (etwa um den Faktor 5) als auch die Gesamtleistung in allen parasitären Beugungsordnungen zusammen. Damit kann insgesamt geschlußfolgert werden:

1. Für Gitter mit fester Periode  $d$ , die bei achsenparalleler Lage zu starken parasitären Beugungsordnungen führt, läßt sich die Qualität des Beugungsbildes durch Drehung gegenüber den Achsen des virtuellen Adressrasters bei der Elektronenstrahlbelichtung verbessern.
2. Sind verschiedene Gitterperioden gleichzeitig zu realisieren, kann bei achsenparalleler Lage die unterschiedliche Anpassung an das Adressraster zu starken Unterschieden im Auftreten parasitärer Beugungsordnungen führen. Durch Drehung gegenüber dem Adressraster können qualitativ gleichartige Beugungsbilder der Gitter untereinander erreicht werden.

Neben diesen Verbesserungen zeigt Abbildung 39 aber auch, daß weiterhin parasitäre Beugungsordnungen existieren. Eine grundsätzliche Reduzierung für beliebige Gitterperioden kann nur durch ein wesentlich verkleinertes Adressraster erreicht werden.

## 8 Anwendungen

### 8.1 Allgemeines

Alle bisher beschriebenen Gitterstrukturen können mikrolithografisch hergestellt werden. Damit lassen sich die Strukturparameter und somit auch die Polarisationsseigenschaften innerhalb eines optischen Elementes mit sehr hoher Ortsauflösung variieren. Dies betrifft insbesondere die Polarisationsrichtung (Ausrichtung der Gitterlinien), aber auch die Stärke des Polarisierungseffektes und die Kombination mit anderen polarisationsunabhängigen optischen Funktionen. Diese hohe Ortsauflösung bei der Modulation der polarisierenden Eigenschaften stellt den wesentlichen Vorteil polarisierender Mikrostrukturen dar.

Im Falle konkreter Anwendungen sind jedoch ebenso die Beschränkungen der optischen Eigenschaften (erreichbares Polarisationsverhältnis begrenzt, merkliche Dämpfung der zu nutzenden Polarisationsrichtung, Rest-Transmission der zu sperrenden Polarisationsrichtung, ... ) zu beachten. Diese Beschränkungen können die Funktion des Elementes bzw. des gesamten Systems in verschiedener Art beeinflussen, was anhand von zwei Beispielen dargestellt werden soll.

### 8.2 Mikrooptisches Polarimeter

Variiert man die Richtung der Gitterlinien einer polarisierenden Gitterstruktur und beleuchtet dieses Element mit linear polarisiertem Licht, so ergibt sich eine örtlich variierende Transmission je nach Winkel zwischen der lokalen Ausrichtung der Gitterlinien und der Polarisationsrichtung des einfallenden Lichtes. Wird diese örtlich variierende Intensität mit einem orts aufgelösten Detektor (z.B. CCD-Kamera) gemessen, kann daraus auf die Polarisationsrichtung des einfallenden Lichtes rückgeschlossen werden [105]. Dies ist die Grundidee eines mikrooptischen Polarimeters (Abb. 40a). Wesentlich bei diesem Aufbau ist, daß keine mechanische Bewegung notwendig ist, um verschiedene Transmissionsrichtungen des Analysators zu ermöglichen, da diese verschiedenen Richtungen durch das Analysatordesign fest vorhanden sind. Somit sind sehr schnelle Messungen möglich. Das Meßverfahren läßt sich prinzipiell auf die Analyse von elliptisch polarisiertem Licht, partiell polarisiertem Licht sowie die gleichzeitige Analyse in verschiedenen Wellenlängenbereichen (spektroskopisches Polarimeter) erweitern.

Ein Labormuster eines mikrooptischen Polarimeters entsprechend Abbildung 40a wurde im Rahmen einer Diplomarbeit am IAP untersucht [106]. Als Analysator wurde dabei ein zirkulares Metallstreifengitter eingesetzt (Parameter:  $d = 220\text{ nm}$ ,  $h_{\text{Cr}} = 35\text{ nm}$ ,  $\mathcal{P} \approx 2.3$  nach Montage), als Detektor eine in 12 Segmente unterteilte Fotodiode, auf die das Metallstreifengitter unmittelbar aufgesetzt und durch Verkleben fixiert wurde (Abb. 40b und 40c). Mit diesem Aufbau konnten Veränderungen der Polarisationsrichtung mit einer Genauigkeit besser als  $0.05^\circ$  (bei linear polarisiertem Licht) bei einer Meßrate von ca. 300 Hz gemessen werden [106].

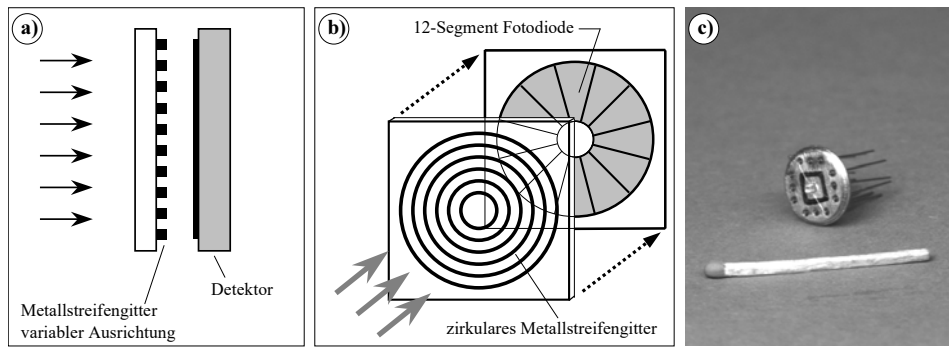


Abbildung 40: a) Prinzip eines mikrooptischen Polarimeters; b) Anordnung von zirkularem Metallstreifengitter und 12-Segment-Fotodiode; c) Foto des gesamten Elementes (das polarisierende Gitter befindet sich auf der Unterseite des auf die Fotodiode geklebten Glasblocks)

Als nachteilig für die Genauigkeit der absoluten Bestimmung der Polarisationsrichtung erwies sich, daß die Polarisationsseigenschaften des Analysators über einer Teilfläche des Detektors nicht konstant waren. Dies beruht auf dem hier benutzten zirkularen Design des Analysatorgitters (somit Variation der Polarisationsrichtung über einer Detektor-Teilfläche, Variation der Stärke des Polarisierungseffektes wegen der in Abschnitt 7.2 erläuterten richtungsabhängigen Dosischwankung sowie starke Empfindlichkeit gegen axiale Dejustierung beim Befestigen des Metallstreifengitters auf dem Detektor). Durch eine andere Getaltung von Analysator und Detektor (definierte und konstante Richtung der Gitterlinien über einem Detektorelement) können diese Effekte zukünftig vermieden werden.

Nicht nachteilig auf die Genauigkeit wirkte sich dagegen der (an sich relativ mäßige) Polarisierungseffekt  $\mathcal{P} \approx 2.3$  aus. Beim in [106] verwendeten Verfahren zur Bestimmung der Polarisationsrichtung (Auswertung von zwei festen Sektoren der Fotodiode) ist wesentlich, daß die Transmission der Metallstreifengitter in Sperrichtung so hoch ist, daß sie mit dem Detektor noch genügend genau gemessen werden kann. Bei Verwendung sehr stark polarisierender Strukturen (mit entsprechend geringer Transmission in Sperrichtung) wäre dies u.U. nicht mehr gegeben, im vorliegenden Fall war diese Forderung aber erfüllt. Dies ist ein Beispiel, daß die nicht-vollständige Polarisation des Lichtes durch die hier untersuchten Metallstreifengitter mit begrenztem Aspektverhältnis keinen Nachteil darstellen muß. Generell können die o.g. Beschränkungen der optischen Eigenschaften bei meßtechnischen Anwendungen meistens problemlos durch eine Kalibrierung kompensiert werden.

### 8.3 Diffraktive Elemente mit Polarisationsmultiplexing

Diffraktive Elemente haben die Aufgabe, eine einfallende Lichtwelle mit vorgegebenen Eigenschaften in eine gewünschte Signalwelle zu transformieren [107]. Können die optischen Eigenschaften des diffraktiven Elementes für zwei (senkrecht aufeinanderstehende) Polarisationsrich-



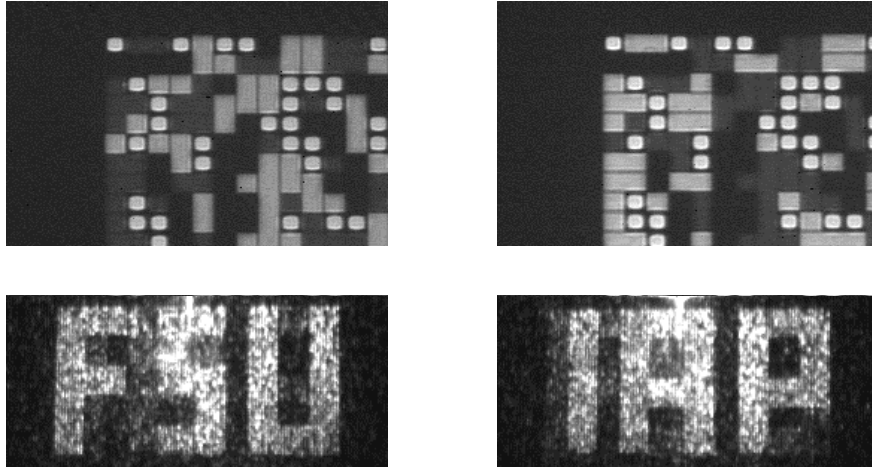


Abbildung 41: oben: diffraktives Element mit Polarisationsmultiplexing (Pixelgröße  $4\,\mu\text{m} \times 4\,\mu\text{m}$ ), beleuchtet mit  $P_x$ -Polarisation (links) bzw.  $P_y$ -Polarisation (rechts); unten: Beugungsbild für  $P_x$ -Polarisation (links) bzw.  $P_y$ -Polarisation (rechts)

tungen des einfallenden Lichtes unabhängig voneinander festgelegt werden, lassen sich damit gezielt zwei unterschiedliche Signalwellen erzeugen. Derartige diffraktive Elemente mit Polarisationsmultiplexing wurden in der Literatur bereits mehrfach beschrieben, wobei die polarisationsabhängige Funktion durch Strukturierung natürlich-doppelbrechender Materialien [108]-[111], Strukturierung dichroitischer Polarisationsfolien [112] oder Verwendung künstlich doppelbrechender dielektrischer Subwellenlängenstrukturen [17, 113, 114] erreicht wurde. Die Realisierung solcher Elemente auf der Basis von Subwellenlängen-Metallstreifengittern wurde am IAP theoretisch und experimentell untersucht [115]. Da die diffraktiven Elemente dabei Amplitudenelemente darstellen, ist von vornherein klar, daß die hierbei maximal erreichbare Beugungseffizienz wesentlich niedriger liegt als bei Phasenelementen aus [108]-[111] und [17, 113, 114].

Die untersuchten diffraktiven Elemente bestanden aus  $256 \times 256$  Pixeln mit jeweils  $4\,\mu\text{m} \times 4\,\mu\text{m}$  Größe, die sich entsprechend den gewünschten Transmissionseigenschaften für die beiden Polarisationsrichtungen (die hier als  $P_x$  und  $P_y$  bezeichnet werden sollen) vier verschiedenen Typen zuordnen lassen (vgl. Abb. 41 oben):

1. unstrukturierte Metallschicht: Minimale Transmission  $T_{\min}$  für  $P_x$  und  $P_y$ ;
2. Metallstreifengitter mit waagerechter Linienausrichtung: Maximale Transmission  $T_{\max}^G$  für  $P_x$ , minimale Transmission  $T_{\min}^G$  für  $P_y$ ;
3. Metallstreifengitter mit senkrechter Linienausrichtung: Maximale Transmission  $T_{\max}^G$  für  $P_y$ , minimale Transmission  $T_{\min}^G$  für  $P_x$ ;
4. vollständig entfernte Metallschicht: Maximale Transmission  $T_{\max}$  für  $P_x$  und  $P_y$ .

Dabei sind die Größen  $T_{\min}$  (Transmission der unstrukturierten Metallschicht) und  $T_{\max}$  (Transmission durch das Substrat ohne Metallschicht) relativ fest vorgegeben.  $T_{\min}^G$  und  $T_{\max}^G$  können

dagegen über das Tastverhältnis  $f$  der Gitter beeinflußt werden. Die Designrechnung ergibt, daß das bestmögliche Signal-Rausch-Verhältnis der diffraktiven Elemente erreicht wird, wenn

$$\begin{aligned} T_{\min}^G(f) &= T_{\min}, \\ T_{\max}^G(f) &= T_{\max} \end{aligned} \quad (78)$$

erfüllt ist. Dies läßt sich jedoch für die verwendeten Gitterparameter ( $d = 220 \text{ nm}$ ,  $h = 30 \text{ nm}$ ) nicht erreichen, da für alle potentiell realisierbaren Tastverhältnisse ( $0.2 \lesssim f \lesssim 0.6$ )  $T_{\min} < T_{\min}^G$  und  $T_{\max} > T_{\max}^G$  ist (Abb. 42).

Kann Gleichung 78 nicht exakt erfüllt werden, so muß das Tastverhältnis  $f$  gefunden werden, welches dieser Bedingung am nächsten kommt, d.h.

$$\frac{T_{\max}^G(f) - T_{\min}^G(f)}{T_{\max} - T_{\min}} \rightarrow \text{Maximum} \quad (79)$$

und außerdem die Symmetriebedingung

$$T_{\min}^G(f) - T_{\min} = T_{\max} - T_{\max}^G(f) \quad (80)$$

erfüllt [116]. Gleichung 80 gilt zunächst für genau einen Wert  $f_a$  ( $f_a = 0.6$  in Abb. 42), kann aber auch für  $f < f_a$  realisiert werden, indem in den Pixeln vom Typ 4 die Metallschicht nicht vollständig, sondern nur teilweise entfernt wird, so daß sich statt  $T_{\max}$  eine angepaßte Transmission  $T_{\max}^*$  ergibt (in Abb. 42 für  $f_b = 0.3$  eingezeichnet). Da nun  $f$  wieder weitgehend frei wählbar ist, kann Gleichung 79 betrachtet werden, wobei  $T_{\max}^*$  statt  $T_{\max}$  zu berücksichtigen ist. Der diese Gleichung bestmöglich erfüllende Wert von  $f$  muß für die konkreten Gitterparameter aus der rigorosen Modellierung bestimmt werden, ist aber meist sehr klein (für die vorliegenden Parameter  $f = 0.05$ ). Somit wird zwar das Signal-Rausch-Verhältnis optimiert, aber gleichzeitig die Gesamt-Beugungseffizienz des diffraktiven Elementes (gegenüber einem Design mit  $f_a$ ) wesentlich reduziert. Mit einem näher an  $f_a$  liegenden Tastverhältnis wird daher ein Kompromiß zwischen Signal-Rausch-Verhältnis und Beugungseffizienz erreicht.

Bei der Herstellung derartiger Elemente ergibt sich als wesentlichstes Problem, daß das vorgesehene Tastverhältnis der Gitter nicht genau eingehalten werden kann (vergl. Abschnitt 3.1.6). Wie Abbildung 42 zeigt, bewirkt ein Fehler  $\Delta f = \pm 0.05$  bereits sehr starke Abweichungen der realen Transmissionen von der Bedingung nach Gleichung 80 (sowohl für  $f_a$  als auch für alle  $f < f_a$ ), was das Signal-Rausch-Verhältnis wesentlich verschlechtert [116].

Um experimentell ein gutes Signal-Rausch-Verhältnis und eine gute Beugungseffizienz der hier betrachteten Elemente zu erhalten, sind also Gitterparameter erforderlich, bei denen

1. die Gleichungen 79 und 80 erfüllt sind, und
2. technologisch bedingte Abweichungen von  $f$  keine wesentliche Veränderung bewirken.

Wie die gepunkteten Kurven in Abbildung 42 zeigen, kann dies z.B. bei  $d = 50 \text{ nm}$ ,  $h = 50 \text{ nm}$  und  $f = 0.6 \pm 0.05$  näherungsweise erreicht werden. Ein derartiges Metallstreifengitter mit

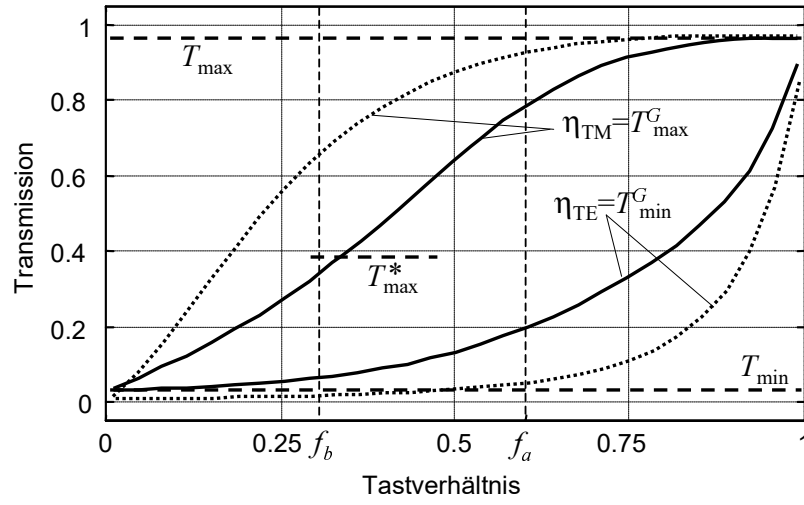


Abbildung 42: Transmission der verschiedenen Pixel eines diffraktiven Elementes mit Polarisationsmultiplexing:  $T_{\max}$  und  $T_{\min}$ : Polarisationsunabhängige Pixel,  $T_{\max}^G$  und  $T_{\min}^G$ : Polarisationsabhängige Transmission der Metallstreifengitter bei  $d = 220$  nm,  $h = 30$  nm (gepunktete Kurven für  $d = 50$  nm,  $h = 50$  nm),  $T_{\max}^*$ : angepaßte Transmission für  $f = 0.3$

$\mathcal{A} = 2.5$  ist aber mit der hier benutzten Herstellungstechnologie nicht realisierbar. Für die in der vorliegenden Arbeit erreichbaren Gitterparameter läßt sich *keine* der beiden Bedingungen erfüllen. Es zeigt sich somit, daß bei diffraktiven Elementen mit Polarisationsmultiplexing die Beschränkungen der optischen Eigenschaften der Metallstreifengitter eine direkte nachteilige Wirkung auf die Funktion der Elemente haben.

## 9 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden polarisierende Subwellenlängen-Metallstreifengitter im sichtbaren Spektralbereich als Beispiel einer optischen Mikrostruktur untersucht. Dabei wurden sowohl theoretische als auch technologische und experimentelle Aspekte behandelt, um einen umfassenden Einblick in wesentliche Eigenschaften und Probleme optischer Mikrostrukturen zu erhalten.

Die theoretische Untersuchung erfolgte mit Hilfe der rigorosen Beugungstheorie (Fourier-Entwicklungs-Methode). Damit war es möglich, den Einfluß der verschiedenen Gitterparameter detailliert zu erfassen und Auftreten und Stärke des normalen bzw. inversen Polarisierungseffektes zu bestimmen. Daneben konnte die Existenz des inversen Polarisierungseffektes auch im Rahmen der Effektiven-Medium-Theorie nachgewiesen werden. Letztere bildet aber kein zuverlässiges Modell zur Beschreibung der hier untersuchten Gitter.

Die Modellierung der Gitter wurde mit der Betrachtung der Herstellungstechnologie und der Abschätzung erreichbarer Gitterparameter verknüpft. Es konnte gezeigt werden, daß für die hier untersuchten binären Metallstreifengitter die Stärke des normalen Polarisierungseffektes durch das erreichbare Aspektverhältnis limitiert wird. Damit ist eine Optimierung der zur experimentellen Arbeit verwendeten Parameter möglich. Parallel dazu ergibt sich, daß die Begrenzung des normalen Polarisierungseffektes nur überwunden werden kann, wenn

- das maximal herstellbare Aspektverhältnis erhöht wird;
- statt des normalen Polarisierungseffektes der inverse Effekt ausgenutzt wird; oder
- eine nicht-binäre Gittergeometrie verwendet wird.

Die letzten beiden Schlußfolgerungen wurden erfolgreich experimentell umgesetzt.

Mit Hilfe der Elektronenstrahlolithografie, des Trockenätzens und des „Lift-off“-Verfahrens wurde eine Vielzahl verschiedener Gitter hergestellt. Damit konnte experimentell sowohl der normale als auch der inverse Polarisierungseffekt realisiert werden. Zusätzlich wurde der Übergang vom normalen zum inversen Polarisierungseffekt in der Umgebung des Rayleigh-Punktes demonstriert. Die besten experimentell erreichten Polarisierungseffekte der verschiedenen untersuchten Gittertypen sollen in der folgenden Tabelle zusammengefaßt werden:

Gittertyp	Metallstreifengitter		überschichtete dielektr. Gitter
Art des Polarisierungseffektes verwendetes Metall	normal Chrom	invers Silber	normal Chrom
Optische Eigenschaften	$\mathcal{P} = 5.2 \pm 0.4$ $\eta_{\text{TM}} = (63 \pm 2)\%$	$1/\mathcal{P} = 25^{+12}_{-8}$ $\eta_{\text{TE}} = (50 \pm 7)\%$	$\mathcal{P} = 1800^{+900}_{-600}$ $\eta_{\text{TM}} = (6.2 \pm 0.2)\%$
bei Wellenlänge	Weißlicht	$\lambda = 625 \text{ nm}$	$\lambda = 633 \text{ nm}$

Für binäre Metallstreifengitter konnten die experimentellen Ergebnisse mit der rigorosen Modellierung verglichen werden. In der Stärke des Polarisierungseffektes ergab sich eine gute Übereinstimmung (gleiche Größenordnung der Ergebnisse) sowohl für den normalen als auch für den inversen Polarisierungseffekt. Die Übereinstimmung für den normalen Polarisierungseffekt ist damit wesentlich besser als bei bisherigen Arbeiten auf diesem Gebiet. Auch die Abhängigkeit des Polarisationsverhaltens von Gitterperiode und Tastverhältnis stimmte in Theorie und Experiment qualitativ überein. Quantitative Abweichungen (insbesondere bezüglich des Tastverhältnisses) werden mit hoher Wahrscheinlichkeit durch das nicht-binäre Gitterprofil (Abweichungen der Form und der Materialzusammensetzung der Metallstege) der hergestellten Gitter verursacht. Die experimentelle Charakterisierung der hergestellten Gitter ergab wesentliche Hinweise hierzu, woraus Schlußfolgerungen für eine ausführliche Untersuchung dieses Problems abgeleitet werden konnten.

Die experimentellen Ergebnisse zeigen, daß typische Parameter von Folien- oder Prismenpolarisatoren ( $\mathcal{P} \gtrsim 100$  und *gleichzeitig* Transmission der zu nutzenden Polarisationsrichtung 80% oder größer) mit den hier betrachteten Gitterstrukturen nicht erreicht werden konnten. Die Ursache liegt in den Beschränkungen der technologisch realisierbaren Gitterparameter. Für den normalen Polarisierungseffekt kann unter dieser Einschränkung immer nur eine Eigenschaft (hohes Polarisationsverhältnis oder hohe Nutztransmission) optimiert werden.

Der Vorteil mikrolithografisch hergestellter polarisierenden Gitterstrukturen liegt demgegenüber in der Möglichkeit, Richtung und Stärke des Polarisierungseffektes mit hoher Ortsauflösung zu variieren. Dies wurde anhand zweier Anwendungsbeispiele demonstriert. Die Beschränkungen der optischen Eigenschaften aufgrund der technologisch realisierbaren Gitterparameter wirken sich dabei unterschiedlich aus: Während im Falle des mikrooptischen Polarimeters der begrenzte Polarisierungseffekt keinen Nachteil darstellt und die (wegen der begrenzten Genauigkeit des Tastverhältnisses) nicht genau fixierten optischen Eigenschaften durch eine Kalibrierung problemlos kompensiert werden können, beeinträchtigen diese beiden Eigenschaften bei diffraktiven Elementen mit Polarisationsmultiplexing die Funktion erheblich. Generell ist jedoch das relativ einfache Herstellungsverfahren, das insbesondere bei metallüberschichteten dielektrischen Gitterstrukturen auch eine Herstellung in großen Stückzahlen (bei Nutzung von Abformungsverfahren zur Replikation der dielektrischen Gitterprofile) möglich erscheinen läßt, als günstig einzuschätzen.

Viele im Rahmen der vorliegenden Arbeit dargelegte Resultate beruhen auf der Vernüpfung theoretischer und experimenteller Untersuchungen. So kann die Erkenntnis, daß das Aspektverhältnis der untersuchten binären Metallstreifengitter die limitierende Größe des normalen Polarisierungseffektes ist, weder allein aus Überlegungen zur Herstellungstechnologie noch aus der

Modellierung der Gittereigenschaften gewonnen werden, sondern nur aus der Verbindung beider Gebiete. Ähnliches gilt für den Einfluß anderer Gitterparameter, wie z.B. für das Tastverhältnis. Sowohl sein Einfluß auf die optischen Eigenschaften als auch die technologisch erreichbare Genauigkeit und die damit verbundenen Probleme (Messung, Kontrolle des Herstellungsprozesses) wurden ausführlich dargelegt. Aus der Kombination beider Eigenschaften resultiert der wesentliche Einfluß gerade dieses Parameters.

Die hier für Metallstreifen-Polarisatoren abgeleiteten Ergebnisse sind auch auf andere Typen von Mikrostrukturen übertragbar, denn es bestehen in vielen Fällen Gemeinsamkeiten oder zumindest Ähnlichkeiten hinsichtlich der verwendeten Herstellungstechnologien, der interessierenden optischen Effekte und der sie beeinflussenden Parameter. So sind beispielsweise Tastverhältnis und Profilform für die in der Einleitung erwähnten künstlichen Materialeigenschaften dielektrischer Subwellenlängengitter entscheidende Parameter, und die in dieser Arbeit gezeigten Schlußfolgerungen bezüglich Genauigkeit, Messung und Kontrolle im Herstellungsprozeß gelten weitgehend analog für dielektrische Strukturen.

Gleichzeitig ist aber festzustellen, daß im generellen Rahmen der Mikrooptik eine Vielzahl verschiedenster Strukturen und Effekte existiert, für die ein einfaches Übertragen der hier beschriebenen Erkenntnisse nicht möglich ist. Derartige Strukturen müssen stattdessen eigenständig untersucht und analysiert werden. Dabei ergibt sich aus den vorliegenden Erfahrungen die Schlußfolgerung, daß das in der Mikrostrukturierung generell existierende Problem, welche physikalischen Effekte realisierbar sind, wo die Beschränkungen dabei liegen und welche Möglichkeiten bestehen, sie zu überwinden, nur durch eine *Verknüpfung* theoretischer, technologischer und experimenteller Untersuchungen gelöst werden kann. Dies wurde in der vorliegenden Arbeit am Beispiel polarisierender Metallstreifengitter aufgezeigt.

# Literatur

- [1] D. H. Raguin, S. Norton, und G. M. Morris, “Subwavelength structured surfaces and their applications,” in *Diffraction and Miniaturized Optics* (S. H. Lee, Hrsg.), Bd. CR49 von *SPIE Critical Reviews*, S. 234–265, SPIE Press, 1993.
- [2] A. Birner, K. Busch, und F. Müller, “Photonische Kristalle,” *Physikal. Blätter*, Bd. 55, Nr. 4, S. 27–33, 1999.
- [3] E. Hecht und A. Zajak, *Optics*. Addison-Wesley, Reading, Ma., 1974.
- [4] G. R. Bird und M. Parrish, “The wire grid as a near-infrared polarizer,” *Journ. Opt. Soc. Am.*, Bd. 50, Nr. 9, S. 886–891, 1960.
- [5] J. P. Auton und M. C. Hutley, “Grid polarisers for use in the near infrared,” *Infrared Physics*, Bd. 12, S. 95–100, 1972.
- [6] J. P. Auton, “Infrared transmission polarizers by photolithography,” *Appl. Opt.*, Bd. 6, Nr. 6, S. 1023–1027, 1967.
- [7] M. Kuittinen, J. Turunen, und P. Vahimaa, “Subwavelength-structured elements,” in *Diffraction Optics for Industrial and Commercial Applications* (J. Turunen und F. Wyrowski, Hrsg.), Kap. 11, S. 303–324, Akademie Verlag, Berlin, 1997.
- [8] P. Yeh, “A new optical model for wire grid polarizers,” *Opt. Comm.*, Bd. 26, Nr. 3, S. 289–292, 1978.
- [9] L. Li, “Recent advantages and present limitations of the electromagnetic theory of gratings,” in *Diffraction Optics*, Bd. 22 von *EOS Topical Meetings Digest Series*, S. 10–11, 1999.
- [10] R. C. McPhedran, L. C. Botten, M. S. Craig, M. Nevière, und D. Maystre, “Lossy lamellar gratings in the quasistatic limit,” *Opt. Acta*, Bd. 29, Nr. 3, S. 289–312, 1982.
- [11] H. Lochbihler und R. Depine, “Diffraction from highly conducting wire gratings of arbitrary cross-section,” *Journ. Mod. Opt.*, Bd. 40, Nr. 7, S. 1273–1298, 1993.
- [12] H. Lochbihler, E. Polnau, und P. Predehl, “Polarimetry of transmission gratings,” *Appl. Opt.*, Bd. 34, Nr. 25, S. 5725–5731, 1995.
- [13] H. W. Southwell, “Multilayer coating design achieving a broadband 90° phase shift,” *Appl. Opt.*, Bd. 19, Nr. 16, S. 2688–2692, 1980.

- [14] D. C. Flanders, "Submicrometer periodicity gratings as artificial anisotropic dielectrics," *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 42, S. 492–494, 1983.
- [15] R. C. Enger und S. K. Case, "Optical elements with ultrahigh spatial-frequency surface corrugations," *Appl. Opt.*, Bd. 22, S. 3220–3228, 1983.
- [16] L. Cescato, E. Gluch, und N. Streibl, "Holographic quarterwave plates," *Appl. Opt.*, Bd. 29, S. 3286–3290, 1990.
- [17] N. Davidson, A. A. Friesem, und E. Hasman, "Computer-generated relief gratings as space-variant polarization elements," *Opt. Lett.*, Bd. 17, S. 1541–1545, 1992.
- [18] C. W. Haggans, L. Li, T. Fujita, und R. K. Kostuk, "Lamellar gratings as polarization components for specularly reflected beams," *Journ. Mod. Opt.*, Bd. 40, Nr. 4, S. 675–686, 1993.
- [19] R.-C. Tyan, P.-C. Sun, und Y. Fainman, "Polarizing beam splitters constructed of form-birefringent multilayer gratings," in *Proc. SPIE*, Bd. 2689, S. 82–89, 1996.
- [20] M. Nevière, "The homogeneous problem," in *Electromagnetic Theory of Gratings* (R. Petit, Hrsg.), Springer Verlag Berlin, 1980.
- [21] J. E. Ford, F. Xu, K. Urquhart, und Y. Fainman, "Polarization-selective computer-generated holograms," *Opt. Lett.*, Bd. 18, Nr. 6, S. 456–458, 1993.
- [22] S. J. Elston, G.-P. Bryan-Brown, und J. R. Sambles, "Polarization conversion from diffraction gratings," *Phys. Rev. B*, Bd. 44, Nr. 12, S. 6393–6400, 1991.
- [23] R. A. Watts und J. R. Sambles, "Reflection gratings as polarization converters," *Opt. Comm.*, Bd. 140, S. 179–183, 1997.
- [24] G. J. Sonek, D. K. Wagner, und J. K. Ballantyne, "Ultraviolet gratings polarizers," *Journ. Vac. Sci. Technol.*, Bd. 19, Nr. 4, S. 921–923, 1981.
- [25] D. C. Flanders und A. E. White, "Application of  $\sim 100\text{\AA}$  linewidth structures fabricated by shadowing techniques," *Journ. Vac. Sci. Technol.*, Bd. 19, Nr. 4, S. 892–896, 1981.
- [26] R. E. Slocum, "Evaporative thin metal films as polarizers," in *Proc. SPIE*, Bd. 307, S. 25–30, 1981.
- [27] M. Gruntman, "Extreme-ultraviolet radiation filtering by freestanding transmission gratings," *Appl. Opt.*, Bd. 34, Nr. 25, S. 5732–5737, 1995.



- [28] G. J. Sonek, D. K. Wagner, und J. K. Ballantyne, "Optical polarizers for the ultraviolett," *Appl. Opt.*, Bd. 22, S. 1270–1272, 1983.
- [29] E. E. Scime, E. H. Anderson, D. J. McComas, und M. L. Schattenburg, "Extreme-ultraviolet polarization and filtering with gold transmission gratings," *Appl. Opt.*, Bd. 34, Nr. 4, S. 648–654, 1995.
- [30] B. Stenkamp, M. Abraham, W. Ehrfeld, E. Knappek, M. Hintermaier, M. T. Gale, und R. Morf, "Grid polarizer for the visible spectral region," in *Proc. SPIE*, Bd. 2213, S. 288–296, 1994.
- [31] H. Tamada, T. Doumuki, T. Yamaguchi, und S. Matsumoto, "Wire-grid polarizer using the s-polarization resonance effekt at the 0.8- $\mu$ m-wavelength band," *Opt. Lett.*, Bd. 22, Nr. 6, S. 419–421, 1997.
- [32] K. Knop, "Reflection grating polarizer for the infrared," *Opt. Comm.*, Bd. 26, Nr. 3, S. 281–283, 1978.
- [33] D. L. Brundrett, E. N. Glytsis, und T. K. Gaylord, "Subwavelength transmission grating retarders for use at 10.6  $\mu$ m," *Appl. Opt.*, Bd. 35, Nr. 31, S. 6195–6202, 1996.
- [34] P. Rai-Choudhury, Hrsg., *Handbook of Microlithography, Micromachining and Microfrabrication*. SPIE Press, 1997.
- [35] K. A. Valiev, *The Physics of Submicron Lithography*. Plenum Press, New York, 1992.
- [36] I. Brodie und J. J. Muray, *The Physics of Micro/Nano-Fabrication*. Plenum Press, New York, 1992.
- [37] P. Pertsch, Hrsg., *Einführende Beiträge zur Mikrolithografie*. Wissenschaftliche Beiträge der FSU Jena, Friedrich-Schiller-Universität Jena, 1982.
- [38] M. Köhler, *Ätzverfahren für die Mikrotechnik*. Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 1998.
- [39] S. H. Lee, Hrsg., *Diffraction and Miniaturized Optics*, Bd. CR49 von *SPIE Critical Reviews*. SPIE Press, 1993.
- [40] E.-B. Kley, "Continuous profile writing by electron and optical lithography," *Microel. Eng.*, Bd. 34, S. 261–298, 1997.
- [41] S. Sinzinger und J. Jahns, *Microoptics*. Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 1999.
- [42] C. V. Shank und R. V. Schmidt, "Optical technique for producing 0.1  $\mu$  periodic surface structures," *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 23, Nr. 3, S. 154ff., 1973.

- [43] H.-J. Lorkowski, "Lacke für die Elektronen- und Röntgenstrahlolithografie," in *Einführende Beiträge zur Mikrolithografie* (P. Pertsch, Hrsg.), Wissenschaftliche Beiträge der FSU Jena, S. 93–110, Friedrich-Schiller-Universität Jena, 1982.
- [44] U. Hübner, *Hochauflösende Elektronenstrahlolithografie für die Submikrometerstrukturierung von HTS-Josephsonkontakten*. Dissertation, Friedrich-Schiller-Universität Jena, 1999.
- [45] G. H. Bernstein und D. A. Hill, "On the attainment of optimum developer parameters for PMMA resist," *Superlattices and Microstructures*, Bd. 11, Nr. 2, S. 237ff., 1992.
- [46] "AR News." Produktinformationen der Firma Allresist GmbH, Berlin (unregelmäßig erscheinend).
- [47] T. Schulmeiß, "Bahnkurvensteuerung der Elektronenstrahlbelichtungsanlage LION LV1." Vortrag im Rahmen des Institutsseminars des IAP der FSU, 1994.
- [48] J. Hoschek und D. Lasser, *Grundlagen der Geometrischen Datenverarbeitung*. Teubner Verlag, Stuttgart, 1. Aufl., 1989.
- [49] G. Farin, *Curves and Surfaces for Computer Aided Geometric Design*. Academic Press, Boston, San Diego, New York, London, Sydney, Tokyo, Toronto, 1. Aufl., 1993.
- [50] A. Bräuer, R. Waldhäusl, W. Karthe, B. Schnabel, und E.-B. Kley, "Efficient focusing and beam shaping grating couplers in planar polymer waveguides," in *Proc. IOOC-95 Hong Kong*, Nr. 3, S. 44–45, 1995.
- [51] R. Waldhäusl, *Experimentelle Realisierung von effizienter Freiraum-Wellenleiter-Kopplung durch Gitter*. Dissertation, Friedrich-Schiller-Universität Jena, 1996.
- [52] Information der Firma Leica Microsystems Lithography Jena GmbH.
- [53] M. T. Postek, K. S. Howard, A. H. Johnson, und K. L. McMichael, Hrsg., *Scanning Electron Microscopy*. Ladd Research Industries, Inc., 1980.
- [54] H.-W. Thümmel, *Durchgang von Elektronen- und Betastrahlung durch Materieschichten*. Akademie-Verlag, Berlin, 1974.
- [55] E.-B. Kley, *Untersuchungen zu Proximity-Funktionen der Elektronenstrahlolithografie auf elementaren Substratmaterialien*. Dissertation, Friedrich-Schiller-Universität Jena, 1987.
- [56] W. Brünger, E.-B. Kley, B. Schnabel, I. Stolberg, M. Zierbock, und R. Plontke, "Low-energy lithography, energy control and variable energy exposure," *Microel. Eng.*, Bd. 27, S. 135–138, 1995.

- [57] B. Niemann, T. Wilhein, T. Schliebe, R. Plontke, O. Fortagne, I. Stolberg, und M. Zierbock, "A special method to create gratings of variable line density by low voltage electron beam lithography," *Microel. Eng.*, Bd. 30, S. 49–52, 1996.
- [58] D. F. Kyser, "Monte carlo calculations for electron microscopy, microanalysis, and micro-lithography," *Scanning Electron Microscopy*, Nr. 1, S. 47–61, 1981.
- [59] T. Tanaka, M. Morigami, und N. Atoda, "Mechanism of resist pattern collapse during development process," *Jap. J. Appl. Phys.*, Bd. 32, S. 6059–6064, 1993.
- [60] Persönl. Mitteilung von J. Fuchs.
- [61] Persönl. Mitteilung von E.-B. Kley.
- [62] Persönl. Mitteilung von D. Schelle.
- [63] A. Roger und D. Maystre, "Inverse scattering method in electromagnetic optics: Application to diffraction gratings," *Journ. Opt. Soc. Am.*, Bd. 70, S. 1483–1495, 1980.
- [64] H. Hübner, G. Nitzsche, und E.-B. Kley, "Optical characterization method for high frequency gratings," in *Proc. SPIE*, Bd. 2863, S. 187–196, 1996.
- [65] C. J. Raymond, M. R. Murnane, S. L. Prins, S. Sohail, H. Naqvi, J. R. McNeil, und J. W. Hosch, "Multiparameter grating metrology using optical scatterometry," *Journ. Vac. Sci. Technol. B*, Bd. 15, Nr. 2, S. 361–368, 1997.
- [66] I. Kallioniemi, J. Saarinen, und E. Oja, "Optical scatterometry of subwavelength diffraction gratings: Neural network approach," *Appl. Opt.*, Bd. 37, Nr. 25, S. 5830–5836, 1998.
- [67] P. Vahimaa, *Studies on Diffractive Optics and Partial Coherence*. Dissertation, Universität Joensuu (Finnland), 1997.
- [68] S. M. Rytov, "Electromagnetic properties of a finely stratified medium," *Sov. Phys. JETP*, Bd. 2, S. 466–475, 1956.
- [69] P. Lalanne und D. Lemercier-Lalanne, "On the effective medium theory of subwavelength periodic structures," *Journ. Mod. Opt.*, Bd. 43, Nr. 10, S. 2063–2085, 1996.
- [70] P. Lalanne und J.-P. Hugonin, "High-order effective-medium theory of subwavelength gratings in classical mountings: Application to volume holograms," *Journ. Opt. Soc. Am. A*, Bd. 15, Nr. 7, S. 1843–1851, 1998.
- [71] M. Born und E. Wolf, *Principles of Optics*. Pergamon Press, Oxford, London, Edinburgh, New York, Paris, Frankfurt, 2. Aufl., 1964.

- [72] J. Turunen, "Diffraction theory of microrelief gratings," in *Micro-Optics: Elements, Systems, and Applications* (H. P. Herzig, Hrsg.), Kap. 2, S. 31–52, Taylor & Francis, London, 1997.
- [73] M. G. Moharam und T. K. Gaylord, "Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction," *Journ. Opt. Soc. Am.*, Bd. 71, S. 811–818, 1981.
- [74] T. K. Gaylord und M. G. Moharam, "Analysis and applications of optical diffraction by gratings," in *Proc. IEEE*, Bd. 73, S. 894–937, 1985.
- [75] J. Chandezon, D. Maystre, und G. Raoult, "A new theoretical method for diffraction gratings and its numerical application," *Journ. Opt.*, Bd. 11, S. 235–241, 1980.
- [76] L. Li und J. Chandezon, "Improvement of the coordinate transformation method for surface-relief gratings with sharp edges," *Journ. Opt. Soc. Am. A*, Bd. 13, Nr. 11, S. 2247–2255, 1996.
- [77] B. H. Kleemann, A. Mitreiter, und F. Wyrowski, "Integral equation method with parametrization of grating profile — theory and experiments," *Journ. Mod. Opt.*, Bd. 43, S. 1323–1349, 1996.
- [78] H. Haidner, *Theorie der Subwellenlängenstrukturen für diffraktive optische Elemente*. Dissertation, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 1994.
- [79] R. Petit, Hrsg., *Electromagnetic Theory of Gratings*. Springer Verlag Berlin, 1980.
- [80] D. Maystre, "Rigorous vector theories of diffraction gratings," in *Progress in Optics* (E. Wolf, Hrsg.), Bd. XXI, S. 1–67, North-Holland, Amsterdam, 1984.
- [81] E. Noponen, *Electromagnetic Theory of Diffractive Optics*. Dissertation, Helsinki University of Technology, Espoo (Finnland), 1994.
- [82] Persönl. Mitteilung von M. Kuittinen.
- [83] L. Li, "Mathematical justification for the recent improvement of the modal method by fourier expansion," in *Diffractive Optics and Micro-Optics*, Bd. 5 von *OSA Technical Digest Series*, S. 18–21, Opt. Soc. of Am., Washington D.C., 1996.
- [84] L. Li, "Use of fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures," *Journ. Opt. Soc. Am. A*, Bd. 13, Nr. 9, S. 1870–1876, 1996.
- [85] J. Turunen, "Form-birefringence limits of fourier expansion methods in grating theory," *Journ. Opt. Soc. Am. A*, Bd. 13, Nr. 5, S. 1013–1018, 1996.

- [86] L. Li, “Multilayer modal method for diffraction gratings of arbitrary depth, profile and permittivity,” *Journ. Opt. Soc. Am. A*, Bd. 10, Nr. 12, S. 2581–2591, 1993.
- [87] B. H. Kleemann, “Polarisationsverhalten von Streifengittern mittels exakter Beugungstheorie.” Vortrag im Rahmen des Institutsseminars des IAP der FSU, 1997.
- [88] W. L. Barnes, T. W. Preist, S. C. Kitson, und J. R. Sambles, “Physical origin of photonic energy gaps in the propagation of surface plasmons on gratings,” *Phys. Rev. B*, Bd. 54, Nr. 9, S. 6227–6244, 1995.
- [89] P. Lalanne und M. P. Jurek, “Computation of the near-field pattern with the coupled-wave method for tm polarization,” *Journ. Mod. Opt.*, Bd. 45, S. 1357–1374, 1998.
- [90] S. Astilean, P. Lalanne, und M. Palamaru, “Electromagnetic energy transport via metallic channels much smaller than the wavelength,” in *Diffraction Optics*, Bd. 22 von *EOS Topical Meetings Digest Series*, S. 129–130, 1999.
- [91] D. R. Lide, Hrsg., *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press, Boca Raton, 64. Aufl., 1984.
- [92] E. D. Palik, Hrsg., *Handbook of Optical Constants of Solids*. Academic Press, Boston, San Diego, New York, London, Sydney, Tokyo, Toronto, 1985.
- [93] M. Kuittinen, J. Turunen, und P. Vahimaa, “Transmission-reversal anomaly in the wire-grid polarizer,” in *Diffraction Optics*, Bd. 12 von *EOS Topical Meetings Digest Series*, S. 130–131, 1997.
- [94] M. Honkanen, V. Kettunen, M. Kuittinen, J. Lautanen, J. Turunen, B. Schnabel, und F. Wyrowski, “Inverse metal-stripe polarizers,” *Appl. Phys. B*, Bd. 68, Nr. 1, S. 81–85, 1999.
- [95] R. W. Wood, “On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum,” *Philosophical Magazine*, Bd. 4, S. 396–402, 1902.
- [96] E. W. Palmer, M. C. Hutley, A. Franks, J. F. Verill, und B. Gale, “Diffraction gratings,” *Rep. Prog. Phys.*, Bd. 38, S. 975–1048, 1975.
- [97] Persönl. Mitteilung von J. Heber.
- [98] Persönl. Mitteilung von V. Kettunen.
- [99] H. Bethge und J. Heydenreich, Hrsg., *Elektronenmikroskopie in der Festkörperphysik*. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1982. (Überarbeitete englische Neuauflage 1987 bei Elsevier).

- [100] I. Anke, E.-B. Kley, H. Hübner, B. Schnabel, und R. Pöhlmann, “Replication of micro-optical profiles in ormocer and other polymers,” in *Proc. SPIE*, Bd. 2783, S. 325–332, 1996.
- [101] R. Waldhäusl, B. Schnabel, P. Dannberg, E.-B. Kley, A. Bräuer, und W. Karthe, “Efficient coupling into polymer waveguides by gratings,” *Applied Optics*, Bd. 36, Nr. 36, S. 9383–9390, 1997.
- [102] L. Li, “Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings,” *Journ. Opt. Soc. Am. A*, Bd. 13, Nr. 5, S. 1024–1035, 1996.
- [103] Persönl. Mitteilung von P. Vahimaa.
- [104] M. C. Hutley, *Diffraction Gratings*. Academic Press, London, 1982.
- [105] E.-B. Kley, B. Schnabel, H. Hübner, und U.-D. Zeitner, “Application of metallic subwavelength gratings for polarization devices,” in *Proc. SPIE*, Bd. 2863, S. 166–174, 1996.
- [106] C. Wille, “Untersuchungen zur Anwendung eines mikrooptischen Polarisationsensors in der Proteinanalytik,” Diplomarbeit, Fachhochschule Jena, Fachbereich Physikalische Technik, 1999.
- [107] J. Turunen und F. Wyrowski, Hrsg., *Diffraction Optics for Industrial and Commercial Applications*. Akademie Verlag, Berlin, 1997.
- [108] F. Xu, J. E. Ford, und Y. Fainman, “Polarization-selective computer-generated holograms: Design, fabrication and applications,” *Appl. Opt.*, Bd. 34, Nr. 2, S. 256–266, 1995.
- [109] S. Liu und Y. Chen, “Multilevel binary phase grating polarization device with a birefringent substrate,” *Opt. Lett.*, Bd. 20, Nr. 17, S. 1832–1834, 1995.
- [110] F. Xu, R.-C. Tyan, Y. Fainman, und J. E. Ford, “Single substrate birefringent computer-generated holograms,” *Opt. Lett.*, Bd. 21, Nr. 7, S. 516–518, 1996.
- [111] N. Nieuborg, A. Kirk, B. Morlion, H. Thienpont, und I. Veretennicoff, “Polarization-selective diffractive optical elements with an index-matching gap material,” *Appl. Opt.*, Bd. 36, Nr. 20, S. 4681–4685, 1997.
- [112] J. Hoßfeld, D. Columbus, H. Sprave, T. Tschudi, und W. Dultz, “Polarizing computer-generated holograms,” *Opt. Eng.*, Bd. 32, Nr. 8, S. 1835–1838, 1993.
- [113] E. Noponen, A. Vasara, J. Turunen, J. M. Miller, und M. R. Taghizadeh, “Synthetic diffractive optics in the resonance domain,” *Journ. Opt. Soc. Am. A*, Bd. 9, Nr. 7, S. 1206–1213, 1992.

- [114] F. Xu, R.-C. Tyan, P.-C. Sun, Y. Fainman, C.-C. Cheng, und A. Scherer, “Form-birefringent computer-generated holograms,” *Opt. Lett.*, Bd. 21, Nr. 18, S. 1513–1515, 1996.
- [115] U. D. Zeitner, B. Schnabel, E.-B. Kley, und F. Wyrowski, “Polarization multiplexing of diffractive elements with metal-stripe grating pixels,” *Appl. Opt.*, Bd. 38, Nr. 11, S. 2177–2181, 1999.
- [116] Persönl. Mitteilung von U. D. Zeitner.

# Danksagung

Die vorliegende Arbeit hätte nicht ohne mannigfaltige Unterstützung vieler Kolleginnen und Kollegen entstehen können. An erster Stelle danke ich meinen Betreuern Prof. Dr. Frank Wyrowski und Dr. Ernst-Bernhard Kley für die vielfältigen Anregungen und intensiven Diskussionen. Voraussetzung hierfür war die Möglichkeit, über mehrere Jahre hinweg am Institut für Angewandte Physik der FSU Jena auf dem Gebiet der Mikrostrukturierung tätig zu sein, die ich insbesondere dem starken persönlichen Einsatz von Dr. Ernst-Bernhard Kley verdanke.

Bei der umfangreichen experimentellen Arbeit wurde ich von einer Vielzahl von Kollegen des IAP unterstützt. Insbesondere Frau Waltraud Gräf, Frau Heike Hübner, Herrn Dr. Jörg Fuchs, Herrn Detlef Schelle und Herrn Uwe Hübner sowie allen weiteren Mitarbeitern der Gruppe Mikrostrukturierung gebührt mein Dank für die geduldige und unkomplizierte Zusammenarbeit. Auch bei allen anderen Mitarbeitern des IAP habe ich bei Problemen immer ein offenes Ohr gefunden. Daneben danke ich auch vielen Mitarbeitern des Fraunhofer-Instituts für Angewandte Optik und Feinmechanik sowie des Instituts für physikalische Hochtechnologie Jena, insbesondere Herrn Rüdiger Pöhlmann für die kooperative Zusammenarbeit am LION LV1.

Der langfristige und intensive Kontakt mit der Firma Leica Microsystems Lithography Jena GmbH war für die vorliegende Arbeit unerlässlich, wobei insbesondere Frau Ines Stolberg, Herrn Dr. Rainer Plontke und Herrn Matthias Zierbock mein Dank gebührt. Last, but not least, möchte ich mich bei Herrn Prof. Jari Turunen und allen seinen Mitarbeitern (insbesondere Herrn Dr. Markku Kuittinen und Herrn Dr. Marko Honkanen) an der Universität Joensuu (Finnland) für die Unterstützung auf dem Gebiet der rigorosen Beugungstheorie bedanken.



# Selbständigkeitserklärung

Ich erkläre, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Hilfsmittel und Literatur angefertigt habe.

Jena, 6. Dezember 1999

Bernd Schnabel

# Lebenslauf

Name, Vorname: Schnabel, Bernd

Geburtsdatum, -ort: 18. Juni 1968, Jena

Schulbildung: 1975 – 1977 Polytechnische Oberschule, Jena  
1977 – 1983 Polytechnische Oberschule mit  
erweitertem Russischunterricht, Jena  
1983 – 1987 Erweiterte Oberschule, Spezialschule  
physikalisch-technischer Richtung, Jena  
1987 Abitur

Wehrdienst: 1987 – 1988 Grundwehrdienst

Studium: 1988 – 1993 Studium der Physik, FSU Jena  
1993 Abschluß als Diplom-Physiker

berufliche Tätigkeit: 1993 – 1999 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut  
für Angewandte Physik der FSU Jena  
1997 dreimonatiger Forschungsaufenthalt an der  
Universität Joensuu (Finnland)

Jena, 6. Dezember 1999

Bernd Schnabel